

Gaussovy kvadratury

Gaussian Quadrature

Zadání bakalářské práce

Student: **Michaela Bailová**
Studijní program: B2647 Informační a komunikační technologie
Studijní obor: 1103R031 Výpočetní matematika
Téma: **Gaussovy kvadratury**
Gaussian Quadrature

Zásady pro vypracování:

Často se stává, že při řešení konkrétních úloh narážíme na problém při výpočtu určitého integrálu (např. ho nelze spočítat analyticky).

Práce bude zaměřena na numerický výpočet určitých integrálů funkcí jedné reálné proměnné. Budou použity n-bodové kvadraturní formule. Pro zajištění maximální přesnosti bude rovněž nalezena optimální poloha uzlových bodů. K tomu budou využity ortogonální systémy polynomů.

Seznam doporučené odborné literatury:

Podle pokynů vedoucího bakalářské práce.

Formální náležitosti a rozsah bakalářské práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

Vedoucí bakalářské práce: **Mgr. Petr Vodstrčil, Ph.D.**

Datum zadání: 16.11.2012

Datum odevzdání: 07.05.2013



doc. RNDr. Jiří Bouchala, Ph.D.
vedoucí katedry



prof. RNDr. Václav Snášel, CSc.
děkan fakulty

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně. Uvedla jsem všechny literární
prameny a publikace, ze kterých jsem čerpala.

V Ostravě 7. května 2013

Bailoca
.....

Na tomto místě bych chtěla poděkovat zejména vedoucímu práce, Mgr. Petru Vodstrčilovi, Ph.D. za veškerý věnovaný čas, značnou dávku trpělivosti a spoustu dobrých rad. Velký dík rovněž patří i rodině a blízkým, kteří mě podporovali po celou dobu psaní práce.

Abstrakt

Gaussova kvadratura je jednou z metod numerické integrace funkcí, pro něž je příliš složité nebo dokonce není možné spočítat hodnotu příslušného integrálu analyticky. V rámci bakalářské práce si nejprve připomeneme některé partie matematické analýzy a lineární algebry, které budeme využívat při práci s kvadraturními formulami. Následně zavedeme pojem kvadraturní formule a prozkoumáme některé její vlastnosti. Poté se budeme zabývat konstrukcí kvadraturní formule maximální možné přesnosti a určováním chyby aproximace. Další kapitoly jsou již věnovány konkrétním kvadraturním formulám, kterými budeme aproximovat hodnoty integrálů specifických typů funkcí. Jednu z nich pak detailně rozebereme a některé vlastnosti nám umožní její konstrukci značně zjednodušit. Výhody kvadraturní formule pak nejlépe odhalíme ve chvíli, kdy ji porovnáme s jinou numerickou metodou, Simpsonovým pravidlem.

Klíčová slova: Ortogonální systémy polynomů, interpolační polynomy, kvadraturní formule, Gaussova kvadratura, chyba Gaussovy kvadraturní formule, Gaussova-Legendrova kvadratura.

Abstract

Gaussian quadrature is one of the methods we use for numerical integration of functions, that are too difficult or even impossible to integrate. In this bachelor thesis we first remind some parts of mathematical analysis and linear algebra used for working with quadrature formulas. Then we will introduce the concept of quadrature formula and explore some of its properties. Thereafter we will follow up a construction of a quadrature with maximum accuracy and determine the error of approximation. Further chapters are devoted to specific quadrature formulas used for approximation of integral of particular types of functions. One of the quadrature formulas we will analyse in detail. Some of its properties will allow to considerably simplify its construction. The best way how to reveal the advantages of quadrature formula is to compare it with the other numerical method, the Simpson's rule.

Keywords: Orthogonal polynomials, interpolation polynomials, quadrature formula, Gaussian quadrature, error of Gaussian quadrature formula, Gauss-Legendre formula.

Obsah

1 Úvod	9
2 Polynomy	10
2.1 Stupeň polynomu	10
3 Ortogonální systémy polynomů	11
3.1 Legendrovy polynomy	11
3.2 Čebyševovy polynomy	13
3.3 Laguerrovy polynomy	13
3.4 Hermitovy polynomy	14
3.5 Vlastnosti kořenů ortogonálních polynomů	14
4 Interpolační polynomy	16
4.1 Lagrangeův interpolační polynom	16
4.1.1 Konstrukce Lagrangeova interpolačního polynomu	16
4.1.2 Chyba Lagrangeova interpolačního polynomu	19
4.2 Hermitův interpolační polynom	23
4.2.1 Konstrukce Hermitova interpolačního polynomu	23
4.2.2 Chyba Hermitova interpolačního polynomu	27
5 Kvadrurní formule a její přesnost	30
5.1 Kvadrurní formule	30
5.2 Věta o existenci a jednoznačnosti	30
5.3 Kvadrurní formule maximální přesnosti	31
5.4 Nutná podmínka	31
5.5 Postačující podmínka	32
5.6 Možné potíže s konstrukcí kvadrurní formule dané přesnosti	33
5.7 Chyba Gaussovy kvadrurní formule	33
6 Gaussova-Legendrova kvadrurní formule	36
6.1 Chyba složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury	45
6.2 Konstrukce Gaussovy-Legendrovy kvadratury s danou přesností	50
6.3 Srovnání chyby Gaussovy-Legendrovy kvadratury a Simpsonova pravidla	50
6.3.1 Složené Simpsonovo pravidlo	51
6.3.2 Složená Gaussova-Legendrova kvadratura	51
7 Gaussova-Čebyševova kvadrurní formule	59
8 Gaussova-Laguerrova kvadrurní formule	61
9 Gaussova-Hermitova kvadrurní formule	63
10 Obecná Gaussova kvadratura	66

OBSAH	7
11 Závěr	70
12 Literatura	71
A Příloha na CD	72

Seznam obrázků

1	Lagrangeův interpolační polynom v zadaných bodech.	18
2	Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci f	19
3	Chyba Lagrangeova interpolačního polynomu.	22
4	Hermitův interpolační polynom příslušný k funkci f	26
5	Chyba Hermitova interpolačního polynomu.	29
6	Graf funkce e^{-x^2}	38

1 Úvod

Na základě poznatků z matematické analýzy víme, že pro každou funkci $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, která je na uzavřeném intervalu $\langle a, b \rangle$ spojitá, existuje integrál

$$\int_a^b f(x) \, dx.$$

V praxi se však může jednat o funkci, pro niž je příliš složité nebo dokonce není možné spočítat hodnotu příslušného integrálu analyticky. V tomto případě jsme nuceni uchýlit se k numerickému řešení. Jednou z těchto numerických metod je i užití kvadrurní formule.

V rámci bakalářské práce si nejprve připomeneme některé partie z matematické analýzy a lineární algebry, které budeme při studiu kvadrurních formulí využívat. Následně zavedeme a přiblížíme pojem kvadrurní formule a budeme se zabývat konstrukcí kvadrurní formule maximálního možného stupně přesnosti, v této fázi nás rovněž bude zajímat optimální poloha uzlů, v nichž budeme schopni takovouto kvadraturu sestavit, a určování chyby, již se při aproximaci integrálu dopustíme.

Dále se již budeme věnovat konkrétním kvadrurním formulím, kterými budeme přibližně počítat hodnoty integrálů specifických typů funkcí. Jednu z nich detailně rozebereme a díky některým vlastnostem budeme schopni její konstrukci značně zjednodušit. Budeme se rovněž zabývat velikostí odhadu chyby, případně skutečnou chybou aproximace, a budeme se snažit najít efektivní způsob, jak jejich hodnotu co nejvíce minimalizovat.

Skutečný přínos kvadrurních formulí však poznáme ve chvíli, kdy ji porovnáme s jinou metodou numerické integrace, Simpsonovým pravidlem.

2 Polynomy

2.1 Stupeň polynomu

V rámci kapitoly se budeme hojně setkávat s pojmem polynom a stupeň polynomu.

Definice 2.1. *Reálným polynmem P stupně nejvýše n -tého rozumíme funkci danou předpisem*

$$P(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n,$$

kde hodnoty $a_0, a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}$ nazýváme jeho koeficienty. V případě, že $a_0 \neq 0$, říkáme, že se jedná o polynom stupně n .

Definice 2.2. *Kořenem polynomu P rozumíme takové číslo α , pro které platí*

$$P(\alpha) = 0.$$

Definice 2.3. *Kořen α polynomu P nazýváme k -násobný, pokud existuje polynom Q takový, že*

$$P(x) = (x - \alpha)^k Q(x)$$

a α není kořenem polynomu Q .

Polynom P má k -násobný kořen α právě tehdy, když platí

$$P(\alpha) = 0,$$

$$P'(\alpha) = 0,$$

$$\dots$$

$$P^{(k-1)}(\alpha) = 0,$$

$$P^{(k)}(\alpha) \neq 0.$$

Je-li polynom Q stupně m , má nejvýše m kořenů, které budeme počítat včetně jejich násobnosti. Z toho plyne, že pokud má polynom stupně nejvýše m více než m kořenů počítaných včetně násobností, musí platit $a_0 = a_1 = \cdots = a_{m-1} = a_m = 0$, tzn. Q je nulový polynom.

3 Ortogonální systémy polynomů

V rámci této kapitoly se budeme zabývat polynomy, které budeme využívat při konstrukci Gaussovy kvadratury.

Definice 3.1. *Nechť w je funkce, která je spojitá na intervalu $I \subseteq \mathbb{R}$. Nechť dále platí $w(x) > 0$ na intervalu I a*

$$\int_I |x|^k w(x) dx < +\infty, \quad \forall k \in \{0, 1, \dots\}. \quad (1)$$

Pak funkci w budeme nazývat váhovou funkcí.

Poznámka 3.1. V případě, že je I uzavřený omezený interval, chápeme integrál (1) jako Riemannův integrál. Pokud je interval I otevřený nebo neomezený, budeme k integrálu (1) přistupovat jako k nevlastnímu integrálu.

Uvažujme vektorový prostor

$$F = \{u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : u \text{ je spojitá na intervalu } I \wedge Du = I \wedge \int_I w(x)u^2(x) dx < +\infty\} \quad (2)$$

Poznámka 3.2. V případě, že $Du \supseteq I$, budeme vztah $u \in F$ interpretovat jako $u|_I \in F$.

Na prostoru F budeme definovat skalární součin

$$\langle u, v \rangle = \int_I w(x)u(x)v(x) dx. \quad (3)$$

Pokud $\langle u, v \rangle = 0$, říkáme, že funkce u a v jsou ortogonální vzhledem ke skalárnímu součinu (3).

V rámci práce se budeme zabývat polynomy, které získáme Gramovou-Schmidtovou ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem ke skalárnímu součinu (3). Tyto polynomy budeme označovat $p_0^I, p_1^I, p_2^I, \dots$. Díky podmínce (1) a poznámce 3.2 jsou funkce $1, x, x^2, \dots$ prvky prostoru F .

3.1 Legendrovy polynomy

Nechť $I = \langle a, b \rangle$ a $w(x) = 1$. Pak prostor F je prostorem všech funkcí spojitých na intervalu $\langle a, b \rangle$ a skalární součin (3) má následující tvar

$$\langle u, v \rangle = \int_a^b u(x)v(x) dx.$$

Ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem k výše uvedenému skalárnímu součinu získáváme takzvané Legendrovy polynomy, které budeme značit $L_n^{\langle a, b \rangle}$.

Poznámka 3.3. Jelikož budeme pro výpočet používat Gramovou-Schmidtovu ortogonalizaci, nebude se jednat přímo o Legendrovy polynomy tak, jak jsou definovány v literatuře, ale o jejich nenulové násobky, přesto je tak v rámci práce budeme nazývat. Pro konstrukci Gaussových kvadratur nám postačí pouze kořeny Legendrových polynomů, jejichž hodnoty se v případě, že daný polynom vynásobíme libovolným nenulovým číslem, nezmění. Ze stejného důvodu zde není zapotřebí získané polynomy normalizovat.

V literatuře se nejčastěji objevují Legendrovy polynomy vzniklé ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem ke skalárnímu součinu

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 u(x)v(x) dx.$$

Takto získané polynomy mají tvar

$$L_0^{(-1,1)}(x) = 1,$$

$$L_1^{(-1,1)}(x) = x,$$

$$L_2^{(-1,1)}(x) = x^2 - \frac{1}{3},$$

$$L_3^{(-1,1)}(x) = x^3 - \frac{3}{5}x.$$

...

Pro účely práce budeme potřebovat počítat i na jiných intervalech, než je $\langle -1, 1 \rangle$. Mezi Legendrovými polynomy $L_n^{(-1,1)}$ a $L_n^{(a,b)}$ existuje následující transformační vztah

$$L^{(a,b)}(x) = L^{(-1,1)}\left(\frac{2(x-a)}{b-a} - 1\right), x \in \langle a, b \rangle. \quad (4)$$

Poznámka 3.4. V praxi bude jednodušší nejprve spočítat kořeny Legendrových polynomů $L_n^{(-1,1)}$ a poté transformovat pouze kořeny. Tímto postupem získáme stejné výsledky jako v případě, že bychom počítali kořeny Legendrova polynomu $L_n^{(a,b)}$. Pro transformaci kořenů budeme používat vztah

$$x^{(a,b)} = \frac{x^{(-1,1)} + 1}{2}(b-a) + a, \quad (5)$$

kde $x^{(-1,1)}$ je kořenem polynomu $L^{(-1,1)}$ a $x^{(a,b)}$ je kořenem polynomu $L^{(a,b)}$.

3.2 Čebyševovy polynomy

Nechť $I = (-1, 1)$ a $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$. Pak prostor F bude prostorem všech funkcí splňujících podmínku (2) a skalární součin (3) bude vypadat následovně

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} u(x)v(x) dx.$$

Ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem k výše uvedenému skalárnímu součinu získáváme takzvané Čebyševovy polynomy.

Čebyševovy polynomy získané orthogonalizací mají tvar

$$T_0^{(-1,1)}(x) = 1,$$

$$T_1^{(-1,1)}(x) = x,$$

$$T_2^{(-1,1)}(x) = x^2 - \frac{1}{2},$$

$$T_3^{(-1,1)}(x) = x^3 - \frac{3}{4}x.$$

...

3.3 Laguerrovy polynomy

Nechť $I = \langle 0, \infty \rangle$ a $w(x) = e^{-x}$. Pak prostor F bude prostorem všech funkcí splňujících podmínku (2) a skalární součin (3) bude vypadat následovně

$$\langle u, v \rangle = \int_0^{+\infty} e^{-x} u(x)v(x) dx.$$

Ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem k výše uvedenému skalárnímu součinu získáváme takzvané Laguerrovy polynomy.

Laguerrovy polynomy získané orthogonalizací mají tvar

$$G_0^{(0,+\infty)}(x) = 1,$$

$$G_1^{(0,+\infty)}(x) = x - 1,$$

$$G_2^{(0,+\infty)}(x) = x^2 - 4x + 2,$$

$$G_3^{(0,+\infty)}(x) = x^3 - 9x^2 + 18x - 6.$$

...

3.4 Hermitovy polynomy

Ačkoli tomu název napovídá, jedná se o systém ortogonálních polynomů, nikoli o Hermitovy interpolační polynomy. Těmi se budeme zabývat v jedné z následujících kapitol.

Nechť $I = (-\infty, \infty)$ a $w(x) = e^{-x^2}$. Pak prostor F bude prostorem všech funkcí splňujících podmínku (2) a skalární součin (3) bude vypadat následovně

$$\langle u, v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} u(x)v(x) dx.$$

Ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem k výše uvedenému skalárnímu součinu získáváme takzvané Hermitovy polynomy.

Hermitovy polynomy získané ortogonalizací mají tvar

$$M_0^{(-\infty, +\infty)}(x) = 1,$$

$$M_1^{(-\infty, +\infty)}(x) = x,$$

$$M_2^{(-\infty, +\infty)}(x) = x^2 - \frac{1}{2},$$

$$M_3^{(-\infty, +\infty)}(x) = x^3 - \frac{3}{2}x.$$

...

3.5 Vlastnosti kořenů ortogonálních polynomů

Věta 3.1. *Nechť $n \in \mathbb{N}$. Pak polynom p_n^I stupně n má právě n různých reálných kořenů, které navíc všechny leží v intervalu I .*

Důkaz. Nechť $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_k$, kde $k \in \mathbb{N}_0$, $k \leq n$, jsou všechny kořeny polynomu p_n^I s lichou násobností, které leží v intervalu I . Pak můžeme polynom p_n^I přepsat do tvaru

$$p_n^I(x) = (x - \alpha_1)^{l_1}(x - \alpha_2)^{l_2} \dots (x - \alpha_k)^{l_k} s(x),$$

kde l_1, l_2, \dots, l_k jsou lichá čísla udávající násobnost jednotlivých kořenů $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$.

Polynom s má přitom kořeny sudé násobnosti, případně kořeny, které se nachází mimo interval I , z čehož vyplývá, že na intervalu I nemění znaménko. Pro polynom s na intervalu I tedy platí jedna z variant $s(x) \leq 0$ nebo $s(x) \geq 0$. Nejprve předpokládejme, že $s(x) \geq 0$ pro $x \in I$. Dále definujme polynom

$$r(x) = (x - \alpha_1)(x - \alpha_2)(x - \alpha_3) \dots (x - \alpha_k).$$

Provedeme integrální skalární součin p_n^I a r . Platí, že

$$\begin{aligned}\langle p_n^I, r \rangle &= \int_I p_n^I(x) r(x) w(x) dx = \\ &= \int_I (x - \alpha_1)^{l_1+1} (x - \alpha_2)^{l_2+1} \dots (x - \alpha_k)^{l_k+1} s(x) w(x) dx > 0.\end{aligned}$$

Díky přenásobení polynomem r získaly kořeny původně liché násobnosti násobnost sudou, integrujeme tedy spojitou nezápornou funkci, která není identicky nulová. Z toho vyplývá, že hodnota integrálu je větší než 0. Na druhou stranu však polynom p_n^I musí být kolmý ke všem polynomům stupně nižšího. Pro počet kořenů liché násobnosti ležících v intervalu I platí $k = \text{st}(r) \geq n$. Je zřejmé $k \leq n$, pro hodnotu k tedy musí platit $k = n$. Z toho vyplývá, že všech n kořenů polynomu p_n^I leží v intervalu I . \square

4 Interpolační polynomy

Pro další výpočty nejprve budeme funkci, jež je obecně příliš složitá pro integraci, interpolovat polynomm, který má pro nás výhodnější vlastnosti. V této kapitole se budeme zabývat konstrukcí Lagrangeova interpolačního polynomu, který budeme dále používat při výpočtech polynomu Hermitova. Právě Hermitův interpolační polynom nám poslouží při následných odhadech chyby, jíž se dopustíme v případě, že integrál funkce f nahradíme Gaussovou kvadraturní formulí.

4.1 Lagrangeův interpolační polynom

V této podkapitole se budeme zabývat konstrukcí interpolačního polynomu daného stupně, jehož graf prochází n uzlovými body se souřadnicemi $[x_1, y_1], [x_2, y_2], \dots, [x_n, y_n]$, kde hodnoty x_1, x_2, \dots, x_n jsou navzájem různá čísla. Hledáme tedy polynom, jehož graf prochází všemi uzlovými body. Vzhledem k tomu, že máme zadáno n podmínek, budeme požadovat, aby získaný polynom měl stupeň nejvýše $n - 1$. Takový polynom budeme nazývat Lagrangeův interpolační polynom.

Lagrangeova interpolačního polynomu můžeme využít i v případě, že máme zadán interval I a v něm n navzájem různých bodů x_1, x_2, \dots, x_n . Dále pak máme zadanou funkci f , která je v bodech x_1, x_2, \dots, x_n definována. V tomto případě jsou druhé souřadnice jednotlivých bodů reprezentovány funkčními hodnotami v bodech x_j a pro hledaný polynom P platí

$$P(x_j) = f(x_j)$$

pro každé $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Poznatky získané v úvodu nám umožňují formulovat následující větu.

Věta 4.1. *Nechť $n \in \mathbb{N}$ a nechť funkce $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je definována na intervalu I , přičemž $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ leží v intervalu I . Pak existuje právě jeden Lagrangeův interpolační polynom P stupně nejvýše $n - 1$ ($n \in \mathbb{N}$) takový, že pro všechna $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ platí $P(x_j) = f(x_j)$.*

Důkaz. Nejprve provedeme důkaz jednoznačnosti. Předpokládejme sporem, že existují dva různé polynomy P a \bar{P} , které řeší úlohu Lagrangeovy interpolace. Platí tedy $P(x_j) = \bar{P}(x_j) = f(x_j)$. Polynom $p(x) = P(x) - \bar{P}(x)$ je tedy nenulový polynom stupně nejvýše $n - 1$. Navíc však platí, že $p(x_j) = 0$ pro každé $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, tedy pro n různých bodů. Musel by tedy být identicky roven nule, čímž se dostáváme do sporu. Důkaz existence je konstruktivní.

4.1.1 Konstrukce Lagrangeova interpolačního polynomu

Pro každé $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ můžeme sestavit polynom

$$l_j(x) = \frac{\prod_{k=1, k \neq j}^n (x - x_k)}{\prod_{k=1, k \neq j}^n (x_j - x_k)}. \quad (6)$$

Polynomy l_j budeme nazývat elementární Lagrangeovy polynomy. V čitateli byl vynechán člen $(x - x_j)$, ve jmenovateli pak $(x_j - x_j)$. Dále platí, že $l_j(x_j) = 1$ a $l_j(x_k) = 0$ pro každé $k \neq j$. Je-li dána funkce f , která je v bodech x_1, x_2, \dots, x_n definována, Lagrangeův interpolační polynom pak vypadá následovně

$$P(x) = \sum_{j=1}^n f(x_j) l_j(x), \quad (7)$$

kde $f(x_j)$ jsou funkční hodnoty příslušné funkce v jednotlivých bodech a l_j jsou elementární Lagrangeovy polynomy.

Platí, že

1. P je polynomem nejvýše $(n - 1)$ -ního stupně.
2. $P(x_j) = f(x_j)$ pro každé $j \in \{1, 2, \dots, n\}$.

□

Problematiku ilustrujeme pomocí následujících příkladů.

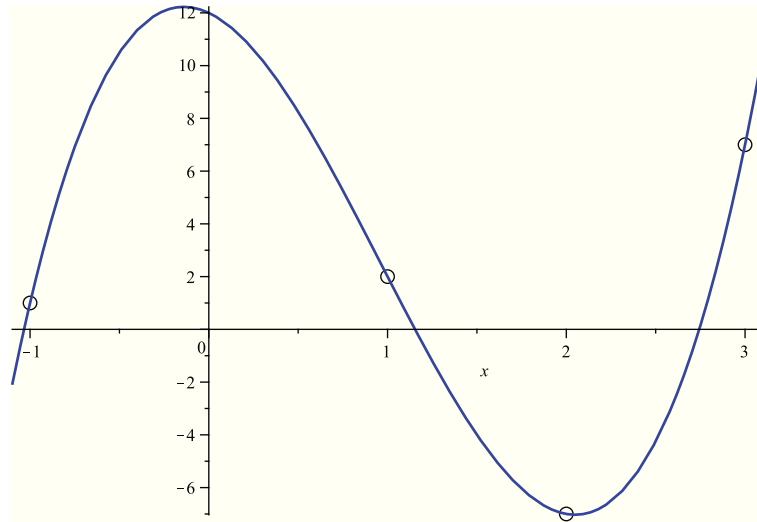
Příklad 4.1. Sestrojte Lagrangeův polynom, jehož graf prochází body $[-1, 1]$, $[1, 2]$, $[2, -7]$, $[3, 7]$.

V první řadě je nutné spočítat elementární Lagrangeovy interpolační polynomy příslušné jednotlivým bodům. Platí

$$\begin{aligned} l_1(x) &= \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(-1-1)(-1-2)(-1-3)} = -\frac{1}{24}x^3 + \frac{1}{4}x^2 - \frac{11}{24}x + \frac{1}{4}, \\ l_2(x) &= \frac{(x+1)(x-2)(x-3)}{(1+1)(1-2)(1-3)} = \frac{1}{4}x^3 - x^2 + \frac{1}{4}x + \frac{3}{2}, \\ l_3(x) &= \frac{(x+1)(x-1)(x-3)}{(2+1)(2-1)(2-3)} = -\frac{1}{3}x^3 - x^2 + \frac{1}{3}x - 1, \\ l_4(x) &= \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(3+1)(3-1)(3-2)} = \frac{1}{8}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{8}x + \frac{1}{4}, \end{aligned}$$

Tvar Lagrangeova interpolačního polynomu bude lineární kombinací uvedených elementárních polynomů, tedy $P(x) = \sum_{j=1}^n y_j l_j(x)$. Hodnoty x_j jsou jednotlivé uzly a y_j jim příslušné druhé souřadnice. Výsledný Lagrangeův interpolační polynom tedy bude vypadat následovně.

$$\begin{aligned} P(x) &= -\frac{1}{24}x^3 + \frac{1}{4}x^2 - \frac{11}{24}x + \frac{1}{4} + 2\left(\frac{1}{4}x^3 - x^2 + \frac{1}{4}x + \frac{3}{2}\right) - \\ &\quad - 7\left(-\frac{1}{3}x^3 - x^2 + \frac{1}{3}x - 1\right) + 7\left(\frac{1}{8}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{8}x + \frac{1}{4}\right) = \\ &= \frac{11}{3}x^3 - \frac{21}{2}x^2 - \frac{19}{6}x + 12 \end{aligned}$$



Obrázek 1: Lagrangeův interpolační polynom v zadaných bodech.

a jeho graf je znázorněn na následujícím obrázku.

Příklad 4.2. Sestrojte Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci $f(x) = e^x$ v bodech $x_1 = -1, x_2 = 0, x_3 = 1, x_4 = 2$.

Nejprve spočítáme jednotlivé elementární polynomy

$$l_1(x) = \frac{x(x-1)(x-2)}{(-1)(-1-1)(-1-2)} = -\frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{3}x,$$

$$l_2(x) = \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(0+1)(0-1)(0-2)} = \frac{1}{2}x^3 - x^2 - \frac{1}{2}x + 1,$$

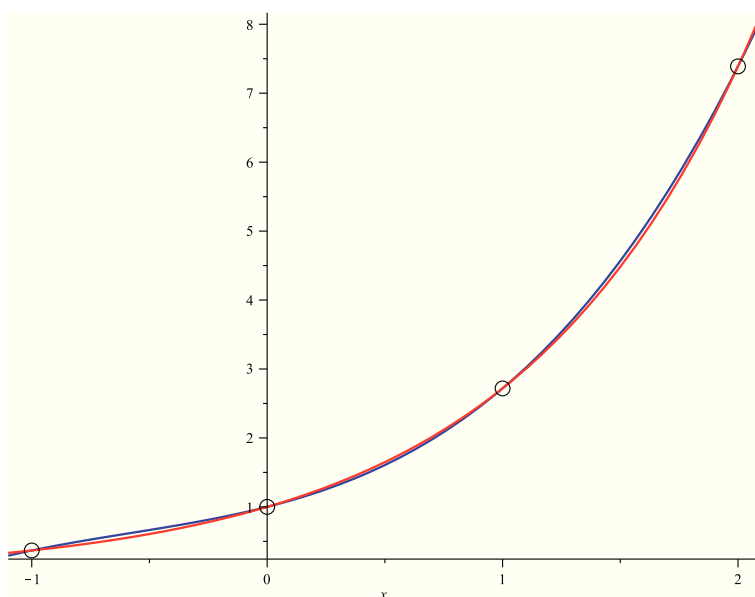
$$l_3(x) = \frac{(x+1)x(x-2)}{(1+1)1(1-2)} = -\frac{1}{2}x^3 + \frac{1}{2}x^2x,$$

$$l_4(x) = \frac{(x+1)x(x-1)}{(2+1)2(2-1)} = -\frac{1}{6}x^3 - \frac{1}{6}x.$$

$P(x) = \sum_{j=1}^n f(x_j)l_j(x)$, kde $f(x_j)$ jsou hodnoty funkce f v jednotlivých uzlech. Výsledný Lagrangeův interpolační polynom:

$$P(x) = -\frac{1}{6}e^{-1}x^3 + \frac{1}{2}e^{-1}x^2 - \frac{1}{3}e^{-1}x + \frac{1}{2}x^3 - x^2 - \frac{1}{2}x + 1 - \frac{1}{2}ex^3 + \frac{1}{2}ex^2 + ex + \frac{1}{6}e^2x^3 - \frac{1}{6}e^2x.$$

Červenou barvou je zde znázorněna původní funkce, modrou graf Lagrangeova interpolačního polynomu.

Obrázek 2: Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci f .

4.1.2 Chyba Lagrangeova interpolačního polynomu

V případě, že se rozhodneme interpolovat funkci pomocí Lagrangeova interpolačního polynomu, dopoušíme se jisté chyby, kterou budeme značit R . Tato chyba bude rovněž funkcí a její hodnota se bude měnit v závislosti na proměnné x . Pro určování odhadu chyby nám poslouží tento vztah

$$R(x) = f(x) - P(x), \quad x \in Df,$$

kde $f(x)$ je hodnota funkce f v bodě x a $P(x)$ hodnota příslušného Lagrangeova interpolačního polynomu vypočítaného pomocí vztahu (7).

Věta 4.2. *Nechť f je reálná funkce, která má v intervalu I vlastní n -tou derivaci ($n \in \mathbb{N}$). Pak pro každé x ležící v intervalu I existuje bod ξ z intervalu I takový, že platí*

$$R(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)}{n!} f^{(n)}(\xi),$$

kde $x_1, x_2, \dots, x_n \in I$, přičemž $x_1 < x_2 < \dots < x_n$, jsou body, v nichž konstruujeme Lagrangeův polynom.

Důkaz. Víme, že hodnoty polynomu v bodech x_j odpovídají funkčním hodnotám funkce f , proto

$$R(x_j) = 0 \quad (\forall j \in \{1, 2, \dots, n\}). \quad (8)$$

Zvolme tedy pevně $x \in I$, které je různé od x_1, x_2, \dots, x_n , a definujme funkci F proměnné t předpisem

$$F(t) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)R(t) - (t - x_0)(t - x_1) \dots (t - x_n)R(x).$$

Je nasnadě ověřit, jak bude tato funkce vypadat v případě, že místo proměnné t dosadíme hodnoty x_1, x_2, \dots, x_n . Dosazením dostaneme

$$F(x_j) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)R(x_j), \quad j \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

Jak ale bylo řečeno, $R(x_j) = 0$, takže $F(x_j) = 0$ pro každé $j \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Stejný postup provedeme také pro pevně zvolený bod x , tedy

$$F(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)R(x) - (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)R(x) = 0.$$

Z toho vyplývá, že funkce F je nulová pro $n + 1$ hodnot intervalu I .

V původním intervalu I budeme uvažovat n subintervalů s krajními body x_1, x_2, \dots, x_n, x , ve kterých má funkce F hodnotu 0. Z předpokladů výše uvedené věty vyplývá, že jsou splněny i předpoklady Rolleovy věty. Víme, že v každém z těchto subintervalů existuje bod, v němž má funkce F nulovou první derivaci. První derivace funkce F tedy má na intervalu I alespoň n nulových bodů. Opět aplikujeme Rolleovu větu a získáme $n - 1$ bodů, v nichž má funkce F nulovou druhou derivaci.

Stejný postup můžeme opakovat. Zjistili jsme, že funkce F má n -tou vlastní derivaci, jejíž hodnota je nulová alespoň pro jeden bod $\xi \in I$. Vztah pro n -tou derivaci bude

$$F^{(n)}(t) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)R^{(n)}(t) - n!R(x).$$

Pro každé $t \in I$ však platí, že

$$R^{(n)}(t) = f^{(n)}(t), \text{ neboť } P^{(n)}(t) = 0.$$

Vztah můžeme přepsat do tvaru

$$F^{(n)}(t) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)f^{(n)}(t) - n!R(x).$$

Za t dosadíme ξ . Víme, že v tomto bodě je n -tá derivace funkce F nulová.

Po úpravě pak chybu Lagrangeova polynomu můžeme vyjádřit jako

$$R(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)}{n!} f^{(n)}(\xi), \quad (9)$$

kde $\xi \in I$.

Zbývá vyšetřit situaci, kdy x není různé od x_1, x_2, \dots, x_n , tzn $x = x_j$ pro některé $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Po dosazení do pravé strany vztahu (9) bude rozdíl $(x - x_j)$ nulový. Vzhledem k (8) platí rovněž $R(x_j) = 0$. Vztah (9) tedy platí pro libovolné $\xi \in I$.

□

Příklad 4.3. Určete chybu interpolace Lagrangeovým interpolačním polynomem z příkladu 4.2.

Platí tedy $f(x) = e^x$, $x_1 = -1$, $x_2 = 0$, $x_3 = 1$, $x_4 = 2$.

Už z grafu je patrné, že se při interpolaci funkce dopouštíme jisté chyby, která se mění v závislosti na proměnné x . Chyba Lagrangeova interpolačního polynomu rovněž závisí na volbě intervalu. Zvolme si tedy interval s krajními body x_1 a x_4 . Nejprve spočítáme absolutní hodnotu skutečné chyby interpolace jako rozdíl $|R(x)| = |f(x) - P(x)|$, kde $-1 \leq x \leq 2$. Předpis pro $P(x)$ jsme už získali v předchozím příkladu, tzn.

$$P(x) = -\frac{1}{6}e^{-1}x^3 + \frac{1}{2}e^{-1}x^2 - \frac{1}{3}e^{-1}x + \frac{1}{2}x^3 - x^2 - \frac{1}{2}x + 1 - \frac{1}{2}ex^3 + \frac{1}{2}ex^2 + ex + \frac{1}{6}e^2x^3 - \frac{1}{6}e^2x.$$

Pro absolutní hodnotu skutečné chyby platí

$$\begin{aligned} |R(x)| = & \left| e^x + \frac{1}{6}e^{(-1)}x^3 - \frac{1}{2}e^{(-1)}x^2 + \frac{1}{3}e^{(-1)}x - \frac{1}{2}x^3 + x^2 + \frac{1}{2}x - 1 + \frac{1}{2}ex^3 - \frac{1}{2}ex^2 - \right. \\ & \left. - ex - \frac{1}{6}e^2x^3 + \frac{1}{6}e^2x \right|. \end{aligned}$$

Dále vypočítáme odhad chyby pomocí vztahu

$$R(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)}{n!} f^{(n)}(\xi).$$

Nejprve je nutné spočítat 4. derivaci funkce f

$$f^{(4)}(\xi) = e^\xi.$$

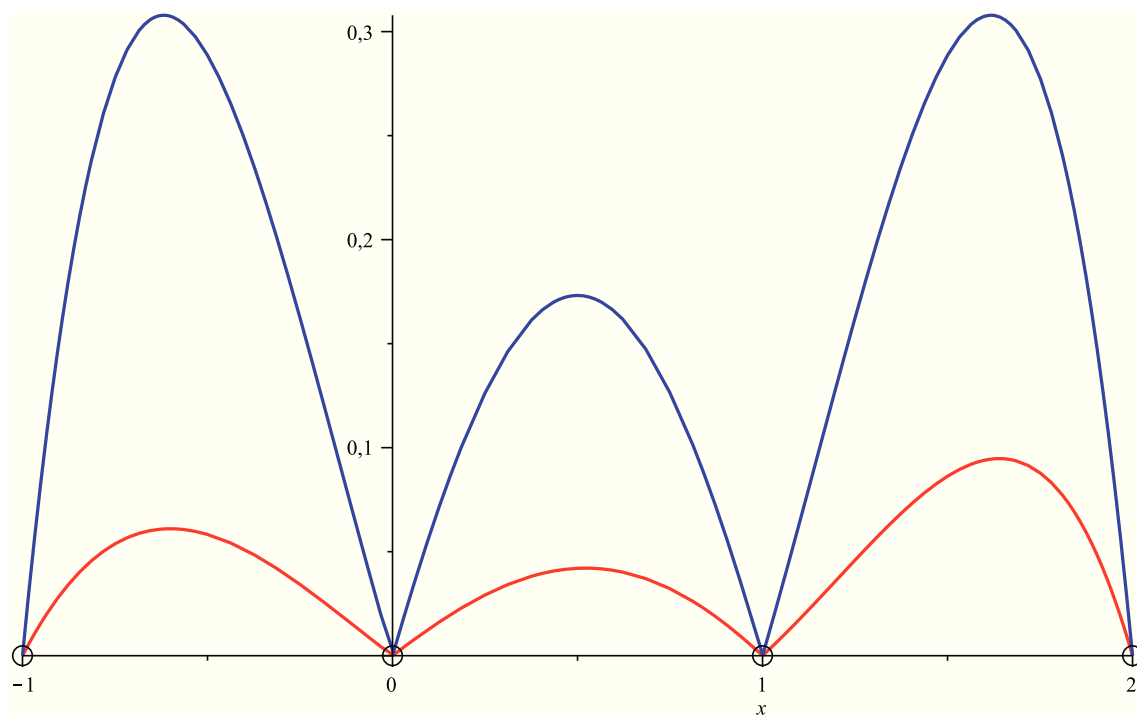
Chceme získat horní odhad velikosti chyby. Funkce $|f^{(4)}(x)| = |e^x| = e^x$ nabývá svého maxima na intervalu $\langle -1, 2 \rangle$ v bodě $x = 2$. Čtvrtou derivaci funkce f tedy můžeme odhadnout jako

$$|f^{(4)}(\xi)| \leq e^2.$$

Odhad chyby pro $R(x)$ tedy bude vypadat následovně

$$|R(x)| \leq \frac{1}{24}e^2(x+1)x(x-1)(x-2) \quad (\overset{\text{ozn}}{=} R_o(x)).$$

Grafy funkcí R_o , R jsou znázorněny na obrázku.



Obrázek 3: Chyba Lagrangeova interpolačního polynomu.

Červenou barvou je znázorněna absolutní hodnota skutečné chyby R , modrou odhad chyby R_o .

4.2 Hermitův interpolační polynom

Druhý typ interpolačního polynomu, kterým se budeme zabývat, je Hermitův interpolační polynom. Opět hledáme polynom, jehož graf prochází n uzlovými body se souřadnicemi $[x_1, f(x_1)]$, $[x_2, f(x_2)]$, \dots , $[x_n, f(x_n)]$, kde x_1, x_2, \dots, x_n jsou navzájem různá čísla.

Oproti Lagrangeovu interpolačnímu polynomu zde však máme také požadavky na hodnoty derivací různých stupňů ve vybraných uzlech. Hledáme tedy polynom, jehož graf prochází všemi uzlovými body a ve vybraných bodech má odpovídající derivace. Pod pojmem uzlové body budeme rozumět body se souřadnicemi $[x_1, f(x_1)]$, $[x_2, f(x_2)]$, \dots , $[x_n, f(x_n)]$. Stupeň Hermitova polynomu bude dán počtem všech parametrů, které jsou pro hodnoty x_1, x_2, \dots, x_n zadány. Při konstrukci obecného Hermitova polynomu tedy musíme počítat s jistou „nepravidelností“, protože v různých bodech může být zadán různý počet derivací různých stupňů. Důkaz existence obecného Hermitova polynomu ovšem není nutné provádět.

Pro práci s kvadraturními formulami nám bohatě stačí jednodušší případ, kdy máme pro každý bod zadánu funkční hodnotu a hodnotu první derivace. Pro takto zadané parametry bude Hermitův interpolační polynom zadán pomocí n bodů stupně nejvýše $2n - 1$.

Věta 4.3. *Nechť $n \in \mathbb{N}$ a nechť funkce $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ má konečnou první derivaci na intervalu I , přičemž platí $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ leží v intervalu I . Pak existuje právě jeden Hermitův interpolační polynom H stupně nejvýše $2n - 1$ takový, že pro všechna $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ platí $H(x_j) = f(x_j)$ a $H'(x_j) = f'(x_j)$.*

Důkaz. Důkaz jednoznačnosti bude podobný jako u Lagrangeova interpolačního polynomu. Předpokládejme sporem, že existují dva různé polynomy H a \bar{H} , které řeší úlohu Hermitovy interpolace. Platí tedy $H(x_j) = \bar{H}(x_j) = f(x_j)$, $H'(x_j) = \bar{H}'(x_j) = f'(x_j)$. Polynom $p = H - \bar{H}$ má alespoň n kořenů násobnosti 2. Polynom p je nenulový polynom stupně nejvýše $2n - 1$ mající alespoň $2n$ kořenů (kořeny jsou počítány včetně násobností). Polynom $H - \bar{H}$ by tedy musel být identicky roven nule, čímž se dostáváme do sporu. Důkaz existence je opět konstruktivní.

4.2.1 Konstrukce Hermitova interpolačního polynomu

V každém uzlu x_i ($i \in \{1, 2, \dots, n\}$) máme zadánu funkční hodnotu $f(x_i)$ a hodnotu první derivace $f'(x_i)$. Je třeba najít polynom H takový, aby platilo

$$\begin{aligned} H(x_i) &= f(x_i) \text{ pro } i \in \{1, 2, \dots, n\}, \\ H'(x_i) &= f'(x_i) \text{ pro } i \in \{1, 2, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Polynom H budeme hledat ve tvaru

$$H(x) = \sum_{i=1}^n h_i(x) f(x_i) + \sum_{i=1}^n \bar{h}_i(x) f'(x_i),$$

kde h_i, \bar{h}_i jsou polynomy stupně $2n - 1$. Přitom stačí, aby platilo

$$h_i(x_j) = \delta_{ij}, \text{ kde } i, j \in \{1, 2, \dots, n\},$$

$$h'_i(x_j) = 0, \text{ kde } i, j \in \{1, 2, \dots, n\},$$

$$\overline{h_i}(x_j) = 0, \text{ kde } i, j \in \{1, 2, \dots, n\},$$

$$\overline{h_i}'(x_j) = \delta_{ij}, \text{ kde } i, j \in \{1, 2, \dots, n\},$$

kde $\delta_{ij} = 0$, pokud $i \neq j$ a $\delta_{ij} = 1$, pokud $i = j$.

Nejprve sestojíme polynom h_i . Jak již bylo řečeno, tento polynom bude stupně $2n-1$ s kořeny $x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$. Polynom bude mít $n-1$ dvojnásobných kořenů a bude ve tvaru

$$h_i(x) = t_i(x)(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_{i-1})^2(x-x_{i+1})^2 \dots (x-x_n)^2,$$

kde t_i je nějaký lineární polynom. Celý vztah lze upravit na tvar

$$h_i(x) = u_i(x) \frac{(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_{i-1})^2(x-x_{i+1})^2 \dots (x-x_n)^2}{(x_i-x_1)^2(x_i-x_2)^2 \dots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \dots (x_i-x_n)} = u_i(x)l_i^2(x),$$

kde l_i je elementární Lagrangeův interpolační polynom příslušný uzlu x_i získaný pomocí vzorce (6). Polynom u_i je lineární a lze ho vyjádřit jako

$$u_i(x) = a_i x + b_i, \text{ kde } i \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

Koeficienty a_i, b_i lze dopočítat z podmínek

$$h_i(x_i) = 1, \text{ tj.}$$

$$u_i(x_i)l_i^2(x_i) = 1, \text{ kde hodnota } l_i^2(x_i) = 1, \text{ takže}$$

$$u_i(x_i) = 1$$

a

$$h'_i(x_i) = 0, \text{ tj.}$$

$$(u_i l_i^2)'(x_i) = u'_i(x_i)l_i^2(x_i) + 2u_i(x_i)l'_i(x_i)l_i(x_i) = 0.$$

Dosazením $u_i(x) = a_i x + b_i$ a vyřešením obou rovnic získáme koeficienty

$$a_i = -2l'_i(x_i),$$

$$b_i = 1 + 2x_i l'_i(x_i).$$

Polynom u_i bude ve tvaru

$$u_i(x) = 1 - 2(x-x_i)l'_i(x_i), \quad i \in \{1, 2, \dots, n\}$$

a hledaný polynom h_i

$$h_i(x) = (1 - 2(x-x_i)l'_i(x_i))l_i^2(x), \quad i \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

Podobným postupem získáme také polynom \bar{h}_i , který je rovněž stupně $2n - 1$. Opět bude mít kořeny $x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$, které jsou dvojnásobné, a kořen x_i , který je jednoduchý. Tvar polynomu \bar{h}_i bude podobný jako v předchozím případě

$$\bar{h}_i(x) = A_i(x - x_i)(x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_{i-1})^2(x - x_{i+1})^2 \dots (x - x_n)^2.$$

Polynom lze přepsat do tvaru

$$\begin{aligned} \bar{h}_i(x) &= B_i(x - x_i) \frac{(x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_{i-1})^2(x - x_{i+1})^2 \dots (x - x_n)^2}{(x_i - x_1)^2(x_i - x_2)^2 \dots (x_i - x_{i-1})^2(x_i - x_{i+1})^2 \dots (x_i - x_n)^2} = \\ &= B_i(x - x_i)l_i^2(x), \end{aligned}$$

i zde využíváme elementární Lagrangeovy interpolační polynomy pro příslušné body. Je zapotřebí dopočítat hodnotu B_i tak, aby platilo $\bar{h}_i'(x_i) = 1$.

$$\bar{h}_i'(x_i) = (B_i(x - x_i)l_i^2(x))'|_{x=x_i} = B_i l_i^2(x_i) + 2B_i(x_i - x_i)l_i(x_i)l_i'(x_i) = B_i = 1.$$

Polynomy \bar{h}_i tedy budou vypadat následovně

$$\bar{h}_i(x) = (x - x_i)l_i^2(x), \quad i \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

Výsledný tvar Hermitova polynomu bude

$$\begin{aligned} H(x) &= \sum_{i=1}^n h_i(x)f(x_i) + \sum_{i=0}^n \bar{h}_i(x)f'(x_i) = \sum_{i=1}^n (1 - 2(x - x_i)l_i'(x_i))l_i^2(x)f(x_i) + \\ &+ \sum_{i=0}^n (x - x_i)l_i^2(x)f'(x_i). \end{aligned}$$

□

Příklad 4.4. Sestrojte Hermitův polynom příslušný k funkci $f(x) = \sin 4x$ v bodech $x_1 = -1, x_2 = 0, x_3 = 1$.

V první řadě vypočítáme elementární Lagrangeovy polynomy v jednotlivých bodech.

$$\begin{aligned} l_1(x) &= \frac{x(x-1)}{2}, \\ l_2(x) &= -(x+1)(x-1), \\ l_3(x) &= \frac{x(x+1)}{2}. \end{aligned}$$

A následně jejich první derivace

$$\begin{aligned} l_1'(x) &= x - \frac{1}{2}, \\ l_2'(x) &= -2x, \\ l_3'(x) &= x + \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Podle vzorce $h_i(x) = (1 - 2(x - x_i)l_i'(x_i))l_i^2(x_i)$ vypočteme elementární polynomy h_i pro hodnoty

x_i .

$$h_1(x) = -\frac{1}{4}(4 + 3x)x^2(x - 1)^2,$$

$$h_2(x) = 0,$$

$$h_3(x) = \frac{1}{4}(1 - 2(x - 1))\frac{3}{2}(x(x + 1))^2$$

a podle vzorce $\bar{h}_i(x_i) = (x - x_i)l_i^2(x_i)$ spočítáme elementární polynomy \bar{h}_i' pro jednotlivé uzly.

$$h_1(x) = \frac{1}{4}(x + 1)(x(x - 1))^2,$$

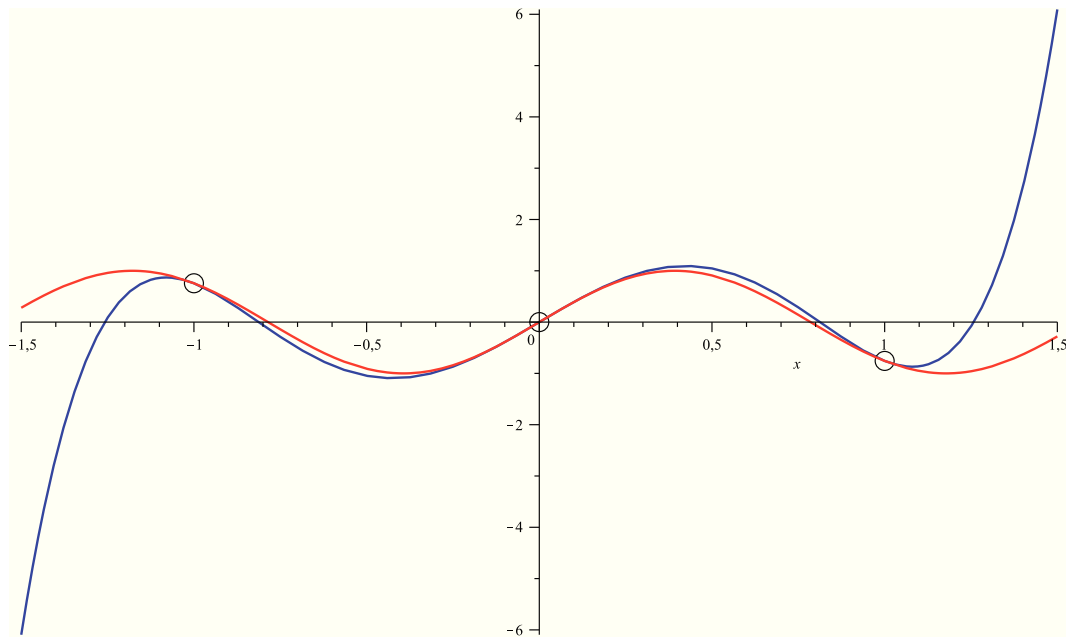
$$h_2(x) = x(-(x + 1)(x - 1))^2,$$

$$h_3(x) = \frac{1}{4}(x - 1)(x(x + 1))^2.$$

Lineární kombinací polynomů h_i, \bar{h}_i získáme výsledný Hermitův polynom

$$H(x) = -\frac{3}{2}x^5 \sin(4) + 2 \cos(4)x^5 + \frac{5}{2}x^3 \sin(4) - 2 \cos(4)x^3 - 8x^3 + 4x^5 + 4x.$$

Graf Hermitova polynomu můžeme vidět na obrázku.



Obrázek 4: Hermitův interpolační polynom příslušný k funkci f

Červenou barvou je znázorněn graf funkce f , modrou pak Hermitův interpolační polynom.

4.2.2 Chyba Hermitova interpolačního polynomu

Pokud se rozhodneme nahradit funkci f Hermitovým interpolačním polynomem, dopustíme se opět jisté nepřesnosti. Velikost chyby, které se dopustíme interpolací, bude funkcí proměnné x . Chybu interpolace pomocí Hermitova interpolačního polynomu budeme značit R a můžeme ji vyjádřit jako rozdíl skutečné funkční hodnoty a hodnoty Hermitova polynomu, tj.

$$R(x) = f(x) - H(x), \quad x \in Df.$$

Postup určování chyby bude podobný jako v případě Lagrangeova polynomu.

Věta 4.4. *Nechť $n \in \mathbb{N}$ a nechť f je reálná funkce, která má v intervalu I vlastní $2n$ -tou derivaci. Pak pro každé x ležící v intervalu I existuje bod ξ z intervalu I takový, že platí*

$$R(x) = \frac{(x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi),$$

kde $x_1, x_2, \dots, x_n \in I$, přičemž $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou body, v nichž konstruuje Hermitův polynom.

Důkaz. Platí, že hodnoty Hermitova polynomu v bodech x_j odpovídají funkčním hodnotám funkce f a derivace Hermitova polynomu v bodech x_j odpovídají derivacím funkce f , proto

$$R(x_j) = 0 \text{ a } R'(x_j) = 0 \quad (\forall j \in \{1, 2, \dots, n\}). \quad (10)$$

Zvolme tedy pevně $x \in I$, které je různé od x_1, x_2, \dots, x_n . Definujeme funkci F proměnné t jako

$$F(t) = (x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 R(t) - (t - x_1)^2(t - x_2)^2 \dots (t - x_n)^2 R(x). \quad (11)$$

Hodnota funkce F v bodech x_j , kde $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, bude vzhledem k (10)

$$F(x_j) = (x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 R(x_j) = 0.$$

Spočítáme také hodnoty první derivace funkce F v bodech x_j . Zderivováním vztahu (11) podle proměnné t a následným dosazením x_j zjistíme, že vzhledem k (10) platí

$$F'(x_j) = 0, \quad j \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

Dále vypočítáme hodnotu funkce F v pevně zvoleném bodu x .

$$F(x) = (x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 R(x) - (x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 R(x) = 0.$$

Ze získaných hodnot víme, že funkce F bude mít hodnotu 0 pro n hodnot x_1, x_2, \dots, x_n . Dále jsme zjistili, že F bude nulová i v pevně zvoleném bodu x . Na intervalu I uvažujeme n subintervalů s nulovými funkčními hodnotami v krajních bodech. Z Rolleovy věty o střední hodnotě víme, že na intervalech vymezených body x_1, x_2, \dots, x_n, x existuje n bodů, v nichž má funkce F nulovou derivaci. Navíc jsme spočítali, že funkce F bude mít nulové derivace také v bodech

x_1, x_2, \dots, x_n . Funkce F' bude mít v intervalu I alespoň $2n$ nulových bodů. Aplikací Rolleovy věty získáme $2n - 1$ bodů, v nichž má funkce F nulovou druhou derivaci.

Opakovanou aplikací Rolleovy věty (podobně jako u Lagrangeova interpolačního polynomu) zjistíme, že funkce F má $(2n)$ -tou vlastní derivaci, jejíž hodnota je nulová alespoň pro jeden bod $\xi \in I$.

Vztah pro $2n$ -tou derivaci bude

$$F^{(2n)}(t) = (x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 R^{(2n)}(t) - (2n)!R(x).$$

Platí však, že $R^{(2n)}(x) = f^{(2n)}(x)$, neboť polynom H je stupně nejvýše $2n - 1$, tudíž $H^{(2n)}(x) = 0$.

Vztah můžeme přepsat do tvaru

$$F^{(2n)}(t) = (x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 f^{(2n)}(t) - (2n)!R(x).$$

Za t dosadíme bod $\xi \in I$. Víme, že platí $F^{(2n)}(\xi) = 0$.

Následně vyjádříme $R(x)$. Rozdíl mezi hodnotou Hermitova polynomu a hodnotou zadané funkce tedy můžeme vypočítat pomocí vzorce

$$R(x) = \frac{(x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi), \quad (12)$$

kde $\xi \in I$.

Zbývá vyšetřit situaci, kdy x není různé od x_1, x_2, \dots, x_n , tzn $x = x_j$ pro některé $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Postup bude podobný jako v případě Lagrangeova interpolačního polynomu. Po dosazení do pravé strany vztahu (12) bude rozdíl $(x - x_j)$ nulový. Vzhledem k (10) platí rovněž $R(x_j) = 0$. Vztah (12) tedy platí pro libovolné $\xi \in I$. □

Příklad 4.5. Určete chybu interpolace Hermitovým interpolačním polynomem z příkladu 4.4.

Platí tedy $f(x) = \sin 4x$, $x_1 = -1$, $x_2 = 0$, $x_3 = 1$.

Nejprve je nutné určit interval, na kterém budeme počítat chybu Hermitova polynomu. Zvolíme interval s krajními body x_1 a x_3 .

Dále spočítáme absolutní hodnotu chyby jako $|R(x)| = |f(x) - H(x)|$, $-1 \leq x \leq 1$. Předpis pro H jsme už získali v předchozím příkladu, tzn.

$$H(x) = \frac{5}{2}x^3 \sin(4) - \frac{3}{2}x^5 \sin(4) + 2 \cos(4)x^5 - 2 \cos(4)x^3 + 4x^5 - 8x^3 + 4x.$$

Pro absolutní hodnotu skutečné chyby platí

$$|R(x)| = \left| \sin 4x - \frac{5}{2}x^3 \sin 4 + \frac{3}{2}x^5 \sin 4 - 2 \cos 4x^5 + 2 \cos 4x^3 - 4x^5 + 8x^3 - 4x \right|.$$

Následně vypočítáme odhad chyby pomocí vztahu

$$R(x) = \frac{(x - x_1)^2(x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi).$$

Nejdříve je nutné spočítat 6. derivaci funkce f

$$f^{(6)}(x) = -4096 \sin(x).$$

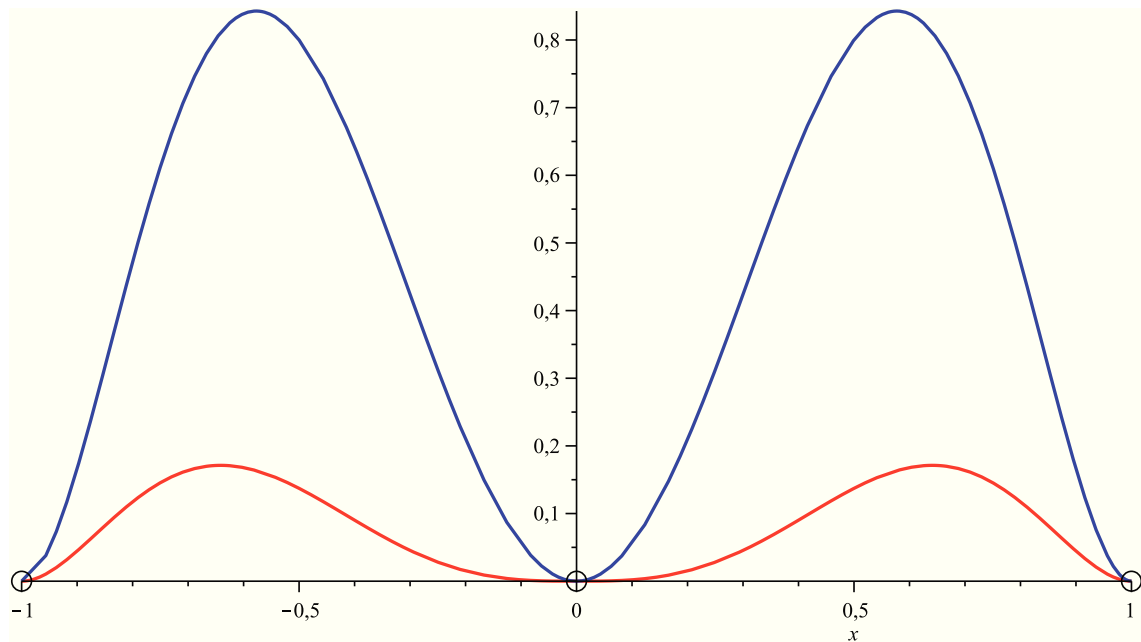
Zajímá nás odhad chyby. Platí

$$|f^{(6)}(x)| \leq 4096.$$

Chybu R můžeme odhadnout jako

$$|R(x)| \leq \frac{((x+1)^2(x)^2(x-1)^2)}{6!} 4096 \quad (\stackrel{ozn}{=} R_o(x)).$$

Grafy $R_o, |R|$ jsou znázorněny na obrázku. Červenou barvou je znázorněna absolutní hodnota



Obrázek 5: Chyba Hermitova interpolačního polynomu.

skutečné chyby R , modrou odhad chyby R_o .

5 Kvadrurní formule a její přesnost

5.1 Kvadrurní formule

Definice 5.1. *Kvadrurní formulí na intervalu I rozumíme předpis*

$$Q^I : f \mapsto \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) (= Q^I(f)), \quad (13)$$

který každé funkci f spojité na intervalu I přiřadí číslo $Q^I(f)$. Číslo $x_1, x_2, \dots, x_n \in I$, kde $x_1 < x_2 < \dots < x_n$, nazýváme uzly kvadrurní formule a $A_1, A_2, \dots, A_n \in \mathbb{R}$ jsou koeficienty kvadrurní formule Q^I .

Poznámka 5.1. Pomocí kvadrurní formule budeme aproximovat hodnotu integrálu funkce $f w$, to znamená

$$\int_I f(x) w(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) = Q^I(f), \quad (14)$$

kde w je váhová funkce (viz definice 3.1).

Definice 5.2. Řekneme, že kvadrurní formule má stupeň přesnosti $k \in \mathbb{N}_0$, jestliže je vztah (14) přesný pro všechny polynomy stupně nejvýše k a pro polynomy stupně $k+1$ se již nějaké (nenulové) chyby dopustíme, tj.

$$\int_I x^j w(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i x_i^j$$

pro každé $j \in \{0, 1, \dots, k\}$,

$$\int_I x^{k+1} w(x) dx \neq \sum_{i=1}^n A_i x_i^{k+1}.$$

5.2 Věta o existenci a jednoznačnosti

Věta 5.1. Pro libovolnou volbu uzlů $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ z intervalu I , kde $n \in \mathbb{N}$, existuje právě jedna kvadrurní formule $Q^I(f) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$, která má stupeň přesnosti alespoň $n - 1$.

Důkaz. Chceme-li, aby měla kvadrurní formule stupeň přesnosti alespoň $n - 1$, musí platit

$$Q^I(1) = A_1 + A_2 + \dots + A_n = \int_I w(x) dx$$

$$Q^I(x) = A_1 x_1 + A_2 x_2 + \dots + A_n x_n = \int_I x w(x) dx$$

$$Q^I(x^2) = A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 + \dots + A_n x_n^2 = \int_I x^2 w(x) dx$$

...

$$Q^I(x^{n-1}) = A_1x_1^{n-1} + A_2x_2^{n-1} + \dots + A_nx_n^{n-1} = \int_I x^{n-1}w(x) dx.$$

Postupně dostáváme soustavu n rovnic s neznámými A_1, A_2, \dots, A_n , kterou lze zapsat pomocí matice X .

Sloupce matice tvoří po sobě jdoucí členy geometrické posloupnosti, tedy platí, že $X_{i,j} = x_j^{i-1}$. Jedná se o Vandermondovu matici, která je regulární pro libovolnou n -tici navzájem různých čísel x_1, x_2, \dots, x_n . Více informací můžeme nalézt v literatuře [3]. \square

5.3 Kvadraturní formule maximální přesnosti

Věta 5.2. *Stupeň přesnosti libovolné kvadraturní formule $Q^I(f) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$ o n uzlech je nejvýše $2n - 1$.*

Důkaz. Zde se nabízí důkaz sporem. Předpokládejme, že existuje kvadraturní formule o n uzlech, která má stupeň přesnosti alespoň $2n$.

Definujeme pomocnou funkci $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n)$, která je polynomem stupně n . Pak by muselo platit, že

$$\int_I \omega^2(x)w(x) dx = Q^I(\omega^2) = \sum_{i=1}^n A_i \omega^2(x_i) = 0, \text{ jelikož } \omega^2 \text{ je stupně } 2n.$$

Zároveň však platí, že $\omega^2 w$ je spojitá nezáporná funkce, která není identicky nulová, musí tedy mít kladný integrál. Tímto se dostáváme do sporu. \square

5.4 Nutná podmínka

V předchozí kapitole jsme vyloučili možnost sestavení kvadraturní formule o n uzlech se stupněm přesnosti $2n$. Nabízí se otázka, jaká situace by nastala, pokud bychom se pokusili pro stejný počet uzlů sestavit kvadraturu se stupněm přesnosti o jedno menším, tedy $2n - 1$. Rovněž vyvstává otázka, zda je tato konstrukce možná pro jakékoli přirozené číslo n .

Mějme tedy kvadraturní formuli

$$Q^I(f) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i),$$

která má stupeň přesnosti $2n - 1$.

Opět definujeme pomocný polynom $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n)$ stupně n . Dále uvažujme libovolný polynom p stupně nejvýše $n - 1$. Pak platí, že ωp je polynomem stupně nejvýše $2n - 1$. Dostáváme tedy vztah

$$\int_I \omega(x)p(x)w(x) dx = Q^I(\omega p) = \sum_{i=1}^n A_i \omega(x_i)p(x_i) = 0.$$

Polynom ω , který je stupně n , musí být kolmý (ve smyslu integrálního skalárního součinu $\langle u, v \rangle = \int_I u(x)v(x)w(x) dx$) ke všem polynomům nižšího stupně. Polynom ω je n -tým ortogonálním polynomem a jeho kořeny jsou zároveň uzly kvadraturní formule Q^I .

Na základě těchto úvah můžeme formulovat následující větu.

Věta 5.3. *Má-li kvadraturní formule $Q^I(f) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$ o n uzlech stupeň přesnosti $2n - 1$, pak uzly této formule musí být kořeny polynomu p_n^I .*

Definice 5.3. *Kvadraturní formuli o n uzlech se stupněm přesnosti $2n - 1$ budeme nazývat Gaussova kvadratura.*

5.5 Postačující podmínka

Za vhodných podmínek je možné větu 5.3 obrátit.

Věta 5.4. *Nechť $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou kořeny polynomu p_n^I stupně n a navíc kvadraturní formule $Q^I(f) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$ (o n uzlech) má stupeň přesnosti alespoň $n - 1$ (což lze zajistit díky větě 5.1). Pak má tato formule stupeň přesnosti $2n - 1$.*

Důkaz. Opět definujeme polynom

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n)$$

stupně n , který je nenulovým násobkem polynomu p_n^I (x_1, \dots, x_n jsou vzhledem k předpokladům věty 5.4 kořeny polynomu p_n^I). Dále uvažujeme libovolný polynom σ stupně nejvýše $2n - 1$. Pokud polynom σ vydělíme polynomem ω se zbytkem, získáváme

$$\sigma(x) = \omega(x)s(x) + r(x),$$

kde platí:

$$\text{st}(s) \leq 2n - 1 - n = n - 1, \text{st}(r) \leq n - 1.$$

Pak platí vztah

$$\int_I \sigma(x)w(x) dx = \int_I \omega(x)s(x)w(x) dx + \int_I r(x)w(x) dx.$$

Polynom p_n^I (a tedy i polynom ω) je ortogonální vůči všem polynomům nižšího stupně, tudíž

$$\int_I \omega(x)s(x)w(x) dx = 0,$$

tedy

$$\begin{aligned} \int_I \sigma(x)w(x) dx &\stackrel{\text{ortogonalita}}{=} \int_I r(x)w(x) dx \stackrel{\text{stupeň } Q}{=} Q^I(r) = \sum_{i=1}^n A_i r(x_i) = \\ &\underbrace{\sum_{i=1}^n A_i \omega(x_i) s(x_i)}_{=0} + \sum_{i=1}^n A_i r(x_i) = \sum_{i=1}^n A_i (\omega(x_i) s(x_i) + r(x_i)) = \sum_{i=1}^n A_i \sigma(x_i) = Q^I(\sigma), \end{aligned} \quad (15)$$

neboť dle předpokladů uvedené věty má kvadraturní formule Q^I stupeň přesnosti alespoň $n - 1$. Z důkazu vyplývá, že kvadraturní formule Q^I má stupeň přesnosti $2n - 1$. \square

5.6 Možné potíže s konstrukcí kvadraturní formule dané přesnosti

V předchozích kapitolách jsme zjistili, že za jistých podmínek jsme schopni sestavit kvadraturní formuli se stupněm přesnosti $2n - 1$. Nabízí se otázka, zda je tato konstrukce možná pro jakékoli přirozené číslo n . Mohlo by se totiž stát, že by příslušný ortogonální polynom p_n^I například neměl reálné kořeny. Věta 3.1 nám však zaručuje, že podobná situace nenastane, tedy že kvadraturní formuli stupně přesnosti $2n - 1$ je možno sestavit pro jakékoli přirozené číslo n , kde n je počet uzlů kvadraturní formule.

5.7 Chyba Gaussovy kvadraturní formule

V případě, že budeme integrovat funkci, jejíž integrál není možné spočítat analyticky, případně pokud je toto řešení příliš složité, můžeme hodnotu integrálu této funkce aproximovat pomocí Gaussovy kvadraturní formule Q^I , tzn.

$$\int_I f(x)w(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) (= Q^I(f)),$$

přičemž x_1, x_2, \dots, x_n , které jsou kořeny polynomu p_n^I , nazýváme uzly kvadraturní formule Q^I , A_1, A_2, \dots, A_n koeficienty kvadraturní formule Q^I příslušné uzlům x_1, x_2, \dots, x_n spočítané podle postupu z kapitoly 5.2 a w je váhová funkce.

Při takové aproximaci integrálu se obecně dopustíme chyby. Tuto chybu označíme $R(f)$ a její hodnotu jsme schopni vypočítat přesně jako rozdíl hodnoty integrálu funkce $f w$ a hodnoty Gaussovy kvadratury na příslušném intervalu.

$$R(f) = \int_I f(x)w(x) dx - Q^I(f). \quad (16)$$

Naším cílem je ovšem odhadnout chybu v případě, kdy obecně nemáme k dispozici skutečnou hodnotu integrálu funkce $f w$. Pro odhadování velikosti chyby, které se dopustíme, když integrál funkce $f w$ nahradíme Gaussovou kvadraturou, nám slouží Hermitův interpolační polynom, o němž byla řeč v kapitole 4.2.

Věta 5.5. *Nechť f je reálná funkce, která má na intervalu I omezenou $2n$ -tou derivaci ($n \in \mathbb{N}$). Pak pro chybu Gaussovy kvadratury platí vztah*

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_I (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 w(x) dx, \quad (17)$$

kde $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou kořeny polynomu p_n^I , w je váhová funkce a Ω je takové číslo, že pro všechna $x \in I$ platí $|f^{(2n)}(x)| \leq \Omega$.

Důkaz. Funkci f interpolujeme pomocí Hermitova interpolačního polynomu H_{2n-1} , který budeme konstruovat v bodech $x_1, x_2, \dots, x_n \in I$ (jeho stupeň tedy bude nejvýše $2n - 1$). Pro tento polynom platí podmínky

$$\begin{aligned} H_{2n-1}(x_i) &= f(x_i) \text{ pro } i \in \{1, 2, \dots, n\}, \\ H'_{2n-1}(x_i) &= f'(x_i) \text{ pro } i \in \{1, 2, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Hodnoty $x_i, i \in \{1, 2, \dots, n\}$ jsou uzly Gaussovy kvadrurní formule. Hodnotu funkce f můžeme vyjádřit jako

$$f(x) = H_{2n-1}(x) + R(x), \quad (18)$$

kde $R(x)$ bude dle věty 4.4

$$R(x) = \frac{(x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi_x). \quad (19)$$

Místo ξ píšeme ξ_x , neboť hodnota ξ závisí na volbě proměnné x . Pro každé x z intervalu I platí, že rovněž příslušné ξ_x leží v intervalu I .

Na základě vztahů (16) a (18) můžeme vyjádřit chybu Gaussovy kvadrurní formule ve tvaru

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_I f(x) w(x) dx - \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) = \left(\int_I H_{2n-1}(x) w(x) dx - \sum_{i=1}^n A_i H_{2n-1}(x_i) \right) + \\ &+ \left(\int_I R(x) w(x) dx - \sum_{i=1}^n A_i R(x_i) \right). \end{aligned}$$

Kvadrurní formule má dle věty 5.4 stupeň přesnosti $(2n - 1)$, takže rozdíl v první závorce bude roven nule. Navíc víme, že pro jednotlivé uzly Hermitův polynom nabývá stejných hodnot jako funkce f . Z toho vyplývá, že $R(x_i) = 0$. Dostáváme rovnost

$$R(f) = \int_I R(x) w(x) dx.$$

S použitím (19) získáme vztah

$$R(f) = \int_I \frac{(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi_x) w(x) dx.$$

Pro absolutní hodnotu chyby aproximace platí

$$\begin{aligned} |R(f)| &= \left| \int_I \frac{(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi_x) w(x) dx \right| \leq \\ &\leq \int_I \left| \frac{(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi_x) w(x) \right| dx. \end{aligned}$$

Nerovnost můžeme následně upravit, jelikož výrazy $\frac{(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2}{(2n)!}$ a $w(x)$ jsou nezáporné. Získáme

$$|R(f)| \leq \int_I \frac{(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2}{(2n)!} |f^{(2n)}(\xi_x)| w(x) dx.$$

Dle dokazované věty můžeme odhadnout funkci $f^{(2n)}$ na intervalu I

$$|f^{(2n)}(\xi_x)| \leq \Omega.$$

Dosazením získáme následující vztah

$$|R(f)| \leq \int_I \frac{(x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2}{(2n)!} \Omega w(x) dx.$$

Hodnota $\frac{\Omega}{(2n)!}$ je nezávislá na proměnné x , můžeme ji tedy vytknout před integrál, čímž obdržíme

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_I (x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2 w(x) dx.$$

□

6 Gaussova-Legendrova kvadraturní formule

První z kvadraturních forem, jimiž se budeme zabývat, je Gaussova-Legendrova kvadratura. Právě tuto formuli budeme v rámci práce detailně rozebírat.

Definice 6.1. Uvažujme váhovou funkci $w(x) = 1$ na intervalu $I = \langle a, b \rangle$. Polynomy, které získáme ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem ke skalárnímu součinu

$$\langle u, v \rangle = \int_a^b u(x)v(x) \, dx,$$

jsou Legendrovy polynomy. Gaussovu kvadraturní formuli pro aproximaci integrálu

$$\int_a^b f(x) \, dx$$

budeme nazývat Gaussova-Legendrova kvadraturní formule.

Věta 6.1. Nechť f je reálná funkce, která má na intervalu $\langle a, b \rangle$ omezenou $2n$ -tou derivaci ($n \in \mathbb{N}$). Pak pro chybu Gaussovy-Legendrovy kvadratury platí vztah

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_a^b (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 \, dx, \quad (20)$$

kde $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{(a,b)}$ a Ω je taková hodnota, že pro každé $x \in \langle a, b \rangle$ platí $|f^{(2n)}(x)| \leq \Omega$.

Důkaz. Obecný důkaz byl proveden v kapitole 5.7. □

Příklad 6.1. Pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule o třech uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_{-1}^2 \cos x \, dx$ a odhadněte chybu aproximace.

Platí: $f(x) = \cos x, x \in \langle -1, 2 \rangle, n = 3$.

Uzly x_1, x_2, x_3 jsou kořeny Legendrova polynomu třetího stupně, který získáme transformací polynomu

$$L_3^{(-1,1)}(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

pomocí vztahu (4). Kořeny Legendrova polynomu $L_3^{(-1,1)}$ budou vypadat následovně $x_1^{(-1,1)} = -\frac{\sqrt{15}}{5}, x_2^{(-1,1)} = 0, x_3^{(-1,1)} = \frac{\sqrt{15}}{5}$.

Kořeny Legendrova polynomu transformovaného na interval $\langle a, b \rangle$ můžeme spočítat dle vzorce

$$x^{\langle a, b \rangle} = \frac{x^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2}(b - a) + a.$$

Po dosazení

$$x^{\langle -1, 2 \rangle} = \frac{3(x^{\langle -1, 1 \rangle} + 1)}{2} - 1.$$

Hodnoty kořenů budou $x_1 = -\frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2}$, $x_2 = \frac{1}{2}$, $x_3 = \frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2}$.

Vypočítáme koeficienty kvadraturní formule

$$Q^{\langle -1, 2 \rangle}(1) = A_1 + A_2 + A_3 = \int_{-1}^2 1 \, dx = 3$$

$$Q^{\langle -1, 2 \rangle}(x) = A_1 \left(-\frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} \right) + A_2 \frac{1}{2} + A_3 \left(\frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} \right) = \int_{-1}^2 x \, dx = \frac{3}{2}$$

$$Q^{\langle -1, 2 \rangle}(x^2) = A_1 \left(-\frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} \right)^2 + A_2 \left(\frac{1}{2} \right)^2 + A_3 \left(\frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} \right)^2 = \int_{-1}^2 x^2 \, dx = 3.$$

Vyřešením soustavy rovnic získáme $A_1 = \frac{5}{6}$, $A_2 = \frac{4}{3}$, $A_3 = \frac{5}{6}$.

Sestavíme Gaussovu-Legendrovu kvadraturu

$$Q^{\langle -1, 2 \rangle}(f) = \frac{5}{6} \cos \left(-\frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} \right) + \frac{4}{3} \cos \frac{1}{2} + \frac{5}{6} \cos \left(\frac{3\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} \right) = 1,751656940.$$

Pro výpočet odhadu chyby použijeme vztah

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_a^b (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 \, dx.$$

Nejprve je nutné odhadnout hodnotu šesté derivace funkce f ($n = 3$)

$$f^{(6)}(x) = -\cos x.$$

Víme, že

$$|f^{(6)}(x)| \leq 1.$$

Pro chybu Gaussovy-Legendrovky kvadratury platí odhad

$$|R(f)| \leq \frac{1}{720} \int_{-1}^2 \left(x + \frac{3\sqrt{15}}{10} - \frac{1}{2} \right)^2 \left(x - \frac{1}{2} \right)^2 \left(x - \frac{3\sqrt{15}}{10} - \frac{1}{2} \right)^2 \, dx = 0,001084821427.$$

Absolutní hodnotu skutečné chyby Gaussovy-Legendrovy kvadratury vypočítáme jako

$$|R(f)| = \left| \int_{-1}^2 \cos(x) dx - Q^{(-1,2)}(x) \right| = 0,0008885280.$$

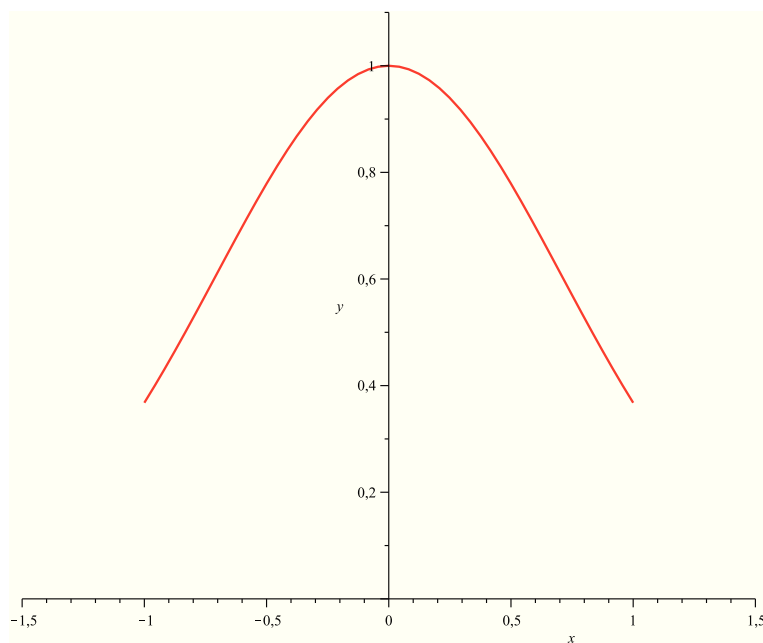
Pro shrnutí, odkad chyby spočítaný pomocí vzorce (20) je přibližně 0,001085, skutečná chyba aproximace pak 0,000889.

Poznámka 6.1. V předchozím příkladu jsme se zabývali konstrukcí Gaussovy-Legendrovy kvadratury funkce, u níž není obtížné spočítat integrál analyticky. Účelem konstrukce Gaussovy-Legendrovy kvadratury je však spočítat integrál funkce, pro kterou analytické řešení není možné nebo je příliš složité. V dalších příkladech se tedy budeme zabývat právě těmito funkcemi.

Příklad 6.2. Pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule o třech uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$ a určete chybu aproximace.

Platí: $f(x) = e^{-x^2}$, $x \in \langle -1, 1 \rangle$, $n = 3$.

Pro ilustraci, graf funkce f bude vypadat následovně.



Obrázek 6: Graf funkce e^{-x^2} .

Gaussovu-Legendrovu kvadraturu budeme konstruovat podle předpisu

$$Q^{(-1,1)}(f) = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + A_3 f(x_3),$$

kde x_1, x_2, x_3 jsou kořeny Legendrova polynomu $L_3^{(-1,1)}$ a A_1, A_2, A_3 koeficienty kvadraturní formule $Q^{(-1,1)}$.

Nejprve spočítáme hodnoty x_1, x_2, x_3 . Kvadraturní formuli uvažujeme na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$, takže Legendrův polynom bude mít tvar

$$L_3^{(-1,1)}(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

s kořeny $x_1 = -\frac{\sqrt{15}}{5}$, $x_2 = 0$, $x_3 = \frac{\sqrt{15}}{5}$.

Dále vypočítáme koeficienty kvadraturní formule jako řešení následující soustavy rovnic

$$Q^{(-1,1)}(1) = A_1 + A_2 + A_3 = \int_{-1}^1 1 \, dx = 2$$

$$Q^{(-1,1)}(x) = A_1 \left(-\frac{\sqrt{15}}{5} \right) + A_2 \cdot 0 + A_3 \frac{\sqrt{15}}{5} = \int_{-1}^1 x \, dx = 0$$

$$Q^{(-1,1)}(x^2) = A_1 \left(-\frac{\sqrt{15}}{5} \right)^2 + A_2 \cdot 0 + A_3 \left(\frac{\sqrt{15}}{5} \right)^2 = \int_{-1}^1 x^2 \, dx = \frac{2}{3}.$$

Vyřešením soustavy rovnic získáváme koeficienty $A_1 = \frac{5}{9}$, $A_2 = \frac{8}{9}$, $A_3 = \frac{5}{9}$. Předpis pro Gaussovu-Legendrovu kvadraturu bude vypadat následovně

$$Q^{(-1,1)}(f) = \frac{5}{9}f(x_1) + \frac{8}{9}f(x_2) + \frac{5}{9}f(x_3) = \frac{5}{9}e^{-(\frac{\sqrt{15}}{5})^2} + \frac{8}{9}e^0 + \frac{5}{9}e^{-(-\frac{\sqrt{15}}{5})^2}.$$

Po vyčíslení dostáváme

$$Q^{(-1,1)}(f) = 1,498679596.$$

Přibližná hodnota integrálu spočítaná pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule tedy bude 1,498679596. Dále je třeba zjistit, jaké chyby se touto aproximací dopustíme. Pro odhad chyby budeme opět používat vztah

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_a^b (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 \, dx.$$

Nejprve odhadneme hodnotu šesté derivace funkce f ($n = 3$), která má následující tvar

$$f^{(6)}(x) = 8e^{-x^2}(-15 + 90x^2 - 60x^4 + 8x^6).$$

Jedná se o poměrně složitou funkci, u které je obtížnější počítat maximum, proto se spokojíme s hrubším odhadem. Označme si tedy pro přehlednost člen $8e^{-x^2}$ jako $f_1(x)$ a člen $(-15 + 90x^2 - 60x^4 + 8x^6)$ jako $f_2(x)$. Platí tedy, že $f^{(6)} = f_1 f_2$. Horní odhad funkce $|f^{(6)}|$ bude součinem horních odhadů funkcí $|f_1|$ a $|f_2|$ na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$.

Víme, že funkce e^{-x^2} nabývá svého maxima v bodě $x = 0$. Z toho vyplývá

$$|f_1(x)| \leq 8e^0 = 8 \quad (\forall x \in \langle -1, 1 \rangle).$$

Zbývá vyšetřit maximum funkce f_2 , k čemuž využijeme metod matematické analýzy. Pro horní odhad funkce $|f_2|$ platí

$$|f_2(x)| \leq -40 + 20\sqrt{10} < 24 \quad (\forall x \in \langle -1, 1 \rangle).$$

Můžeme tedy funkci $f^{(6)}$ odhadnout jako

$$|f^{(6)}(x)| \leq 192 \quad (\forall x \in \langle -1, 1 \rangle)$$

a pro chybu Gaussovy-Legendrovy kvadratury platí

$$|R(f)| \leq \frac{192}{720} \int_{-1}^1 \left(x + \frac{\sqrt{15}}{5}\right)^2 (x - 0)^2 \left(x - \frac{\sqrt{15}}{5}\right)^2 dx = 0,01219047619.$$

Při aproximaci integrálu se dopustíme chyby o velikosti nejvýše 0,01219047619. Díky tomu jsme schopni určit interval, ve kterém se bude nacházet hledaná hodnota integrálu. Platí

$$\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx \in \langle 1,498679596 - 0,012190476; 1,498679596 + 0,012190476 \rangle.$$

Po úpravě, pro hodnotu integrálu počítaného pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadratury platí

$$\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx \in \langle 1,486489120, 1,510870072 \rangle.$$

Pro srovnání, hodnota integrálu funkce f spočítaná numericky pomocí matematického softwaru je

$$\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx = 1,493648266.$$

Jak vidíme, hodnota integrálu se nachází v intervalu, který jsme spočítali. Navíc platí, že odhad chyby je přibližně 2,5 krát větší než chyba skutečná.

Poznámka 6.2. Dále můžeme zjistit, jak se změní hodnota Gaussovy-Legendrovy kvadratury a odhad chyby v případě, že zvýšíme počet uzlů. Postup bude stejný jako v předchozím příkladu.

Příklad 6.3. Pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule o čtyřech uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$ a určete chybu aproximace.

Nechť tedy $n = 4$, $f(x) = e^{-x^2}$, $x \in \langle -1, 1 \rangle$.

Legendrův polynom 4. stupně na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$ bude mít kořeny

$$x_1 = -\frac{\sqrt{525+70\sqrt{30}}}{35}, x_2 = -\frac{\sqrt{525-70\sqrt{30}}}{35}, x_3 = \frac{\sqrt{525-70\sqrt{30}}}{35}, x_4 = \frac{\sqrt{525+70\sqrt{30}}}{35}.$$

Vypočítáme koeficienty kvadraturní formule řešením následující soustavy rovnic.

$$Q^{(-1,1)}(1) = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 = \int_{-1}^1 1 dx = 2$$

$$Q^{(-1,1)}(x) = A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3 + A_4 x_4 = \int_{-1}^1 x dx = 0$$

$$Q^{(-1,1)}(x^2) = A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 + A_3 x_3^2 + A_4 x_4^2 = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}$$

$$Q^{(-1,1)}(x^3) = A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 + A_3 x_3^3 + A_4 x_4^3 = \int_{-1}^1 x^3 dx = 0.$$

Získané koeficienty budou $A_1 = A_4 = \frac{-\sqrt{30}+18}{180}$, $A_2 = A_3 = \frac{\sqrt{30}+18}{36}$.

Na základě získaných hodnot můžeme sestavit Gaussovu-Legendrovu kvadraturu

$$Q^{(-1,1)}(f) = \frac{-\sqrt{30}+18}{180} e^{-\left(-\frac{\sqrt{525+70\sqrt{30}}}{35}\right)^2} + \frac{\sqrt{30}+18}{36} e^{-\left(-\frac{\sqrt{525-70\sqrt{30}}}{35}\right)^2} + \\ + \frac{\sqrt{30}+18}{36} e^{-\left(\frac{\sqrt{525-70\sqrt{30}}}{35}\right)^2} + \frac{-\sqrt{30}+18}{180} e^{-\left(\frac{\sqrt{525+70\sqrt{30}}}{35}\right)^2}.$$

Po vyčíslení dostaneme

$$Q^{(-1,1)}(f) = 1,493334621.$$

Přistoupíme k odhadu chyby. Nejdříve nás bude zajímat odhad 8. derivace ($n = 4$), jejíž předpis bude

$$f^{(8)}(x) = 16e^{-x^2}(105 - 840x^2 + 840x^4 - 224x^6 + 16x^8).$$

Funkci budeme odhadovat podobně jako v předchozím příkladu, tentokrát s využitím matematického softwaru.

$$|f^{(8)}(x)| \leq 16 \cdot 145 = 2320 \quad (\forall x \in \langle -1, 1 \rangle).$$

Po dosazení do vzorce (20) platí

$$|R(f)| \leq \frac{2320}{40320} \int_{-1}^1 \left(x + \frac{\sqrt{525 + 70\sqrt{30}}}{35}\right)^2 \left(x + \frac{\sqrt{525 - 70\sqrt{30}}}{35}\right)^2 \left(x - \frac{\sqrt{525 - 70\sqrt{30}}}{35}\right)^2 \left(x - \frac{\sqrt{525 + 70\sqrt{30}}}{35}\right)^2 dx = 0,0006680344064.$$

Hodnota integrálu se tedy bude nacházet v intervalu

$$\langle 1,492666587; 1,494002655 \rangle,$$

což je ve srovnání s předchozím výsledkem mnohem přesnější odhad.

Poznámka 6.3. Budeme sledovat, jak se mění chyba aproximace v závislosti na počtu uzlů. S vyšším stupněm Legendrových polynomů je pro jejich složitost nutné k výpočtu kořenů používat matematický software a hodnoty již nejsou úplně přesné, neboť se jejich kořeny již musí počítat numericky.

Příklad 6.4. Určete odhad chyby a skutečnou chybu aproximace hodnoty integrálu

$\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$ pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadratury s n uzly, kde $n \in \{2, 3, \dots, 10\}$. Odhady chyb aproximace počítané pomocí vzorců a skutečné chyby počítané pomocí softwaru můžeme vidět v následující tabulce. V posledním sloupci rovněž můžeme sledovat poměr odhadu chyby vůči chybě skutečné.

Počet uzlů	Odhad chyby	Skutečná chyba	Poměr chyb
2	$1,48148 \cdot 10^{-1}$	$6,05856 \cdot 10^{-2}$	2,45
3	$1,21904 \cdot 10^{-2}$	$5,03133 \cdot 10^{-3}$	2,42
4	$6,68034 \cdot 10^{-4}$	$3,13644 \cdot 10^{-4}$	2,13
5	$3,15415 \cdot 10^{-5}$	$1,56551 \cdot 10^{-5}$	2,01
6	$1,26593 \cdot 10^{-6}$	$6,23933 \cdot 10^{-7}$	2,03
7	$4,40590 \cdot 10^{-8}$	$2,32464 \cdot 10^{-8}$	1,89
8	$1,61852 \cdot 10^{-9}$	$7,25840 \cdot 10^{-10}$	2,23
9	$5,20346 \cdot 10^{-11}$	$2,01498 \cdot 10^{-11}$	2,58
10	$1,33064 \cdot 10^{-12}$	$5,03488 \cdot 10^{-13}$	2,64

Jak můžeme vidět, se zvyšujícím se počtem uzlů klesá hodnota skutečné chyby i její odhad. Poměr odhadu chyby a skutečné chyby se pohybuje mezi hodnotami 1,89 a 2,64.

Poznámka 6.4. Zabývejme se opět funkcí $f(x) = e^{-x^2}$ na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$. Nyní budeme zkoumat, jak se změní odhad chyby a skutečná chyba v případě, že se rozhodneme interval nejprve rozdělit tak, abychom zachovali počet uzlů a zároveň na každém subintervalu konstruovali Gaussovu-Legendrovu kvadraturu jen pro dva, případně tři uzly. Výsledky pak můžeme porovnávat s hodnotami ve výše uvedené tabulce.

Uvažujme nejprve 4 uzly. Tentokrát však nebudeme potřebovat Legendrův polynom čtvrtého stupně, místo toho si interval $\langle -1, 1 \rangle$ rozdělíme na dva subintervaly se dvěma uzly v každém subintervalu,

$$I_1 = \langle -1, 0 \rangle,$$

$$I_2 = \langle 0, 1 \rangle$$

a na těchto intervalech již budeme konstruovat Gaussovy-Legendrovy kvadratury pouze pro dva uzly. Zaměříme se nejprve na interval I_1 . Postup bude stejný jako v předchozích příkladech.

Hodnota Gaussovy-Legendrovy kvadratury $Q_1^{(-1,0)}$ bude

$$Q_1^{(-1,0)}(f) = 0,7465946883$$

a hodnota $Q_2^{(0,1)}$

$$Q_2^{(0,1)}(f) = 0,7465946883.$$

Výsledná hodnota složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury $Q_s^{(-1,1)}$ bude součtem $Q_1^{(-1,0)}$ a $Q_2^{(0,1)}$, to znamená

$$Q_s^{(-1,1)}(f) = 1,493189377.$$

Dalším krokem bude odhad chyby pro oba intervaly.

$$|R_1(f)| \leq 0,00462962,$$

$$|R_2(f)| \leq 0,00462962.$$

Výsledný odhad chyby pak bude jejich součtem.

$$|R(f)| \leq 0,00925925.$$

Pro srovnání, skutečná chyba získaná rozdělením intervalu je asi 1,46 krát větší než hodnota v tabulce, která přísluší čtyřem uzlům. Odhad chyby pak bude asi 13,9 krát větší.

Dále uvažujme 6 uzlů. Nejprve rozdělme interval na 3 subintervaly se dvěma uzly v každém subintervalu. Hodnota složené kvadraturní formule bude

$$Q^{(-1,1)}(f) = 0,4255470159 + 0,6424269628 + 0,4255470159 = 1,493520995,$$

$$|R(f)| \leq 0,00060966316 + 0,000365797 + 0,00060966316 = 0,00158512332.$$

Následně zkusme interval $\langle -1, 1 \rangle$ rozdělit na dva subintervaly se třemi uzly v každém subintervalu.

$$Q_s^{(-1,1)}(f) = 0,7468145842 + 0,7468145842 = 1,493629168,$$

$$|R(f)| \leq 0,000099206349 + 0,000099206349 = 0,0001984126984.$$

Jak můžeme vidět, odhad chyby pro dva subintervaly je přibližně desetkrát menší než pro tři subintervaly. Rovněž hodnota kvadratury je v druhém případě bližší hodnotě skutečné (1,493648266). Pro srovnání, odhad chyby pro 3 subintervaly bude 1252 krát větší než hodnota v tabulce, což už je výrazně hrubší odhad. Pro 2 subintervaly bude chyba 157 krát větší.

Další zkoumaný počet uzlů bude 9. Interval rozdělíme na 3 subintervaly se třemi uzly v každém subintervalu.

$$Q_s^{(-1,1)}(f) = 0,4254336684 + 0,7468145842 + 0,4254336684 = 1,493647702,$$

$$\begin{aligned} |R(f)| &\leq 0,5806315820 \cdot 10^{-5} + 0,3483789492 \cdot 10^{-5} + 0,5806315820 \cdot 10^{-5} = \\ &= 0,00001509642113. \end{aligned}$$

Pro srovnání, odhad chyby pro 3 subintervaly bude přibližně 290123 krát větší než příslušná hodnota v tabulce, skutečná chyba pak bude 27991 krát větší.

Poslední sledovaný počet uzlů bude 10. Interval rozdělíme na 5 subintervalů se dvěma uzly v každém subintervalu.

$$\begin{aligned} Q_s^{(-1,1)}(f) &= 0,2116854962 + 0,3377789968 + 0,3947020647 + 0,3377789968 + \\ &+ 0,2116854962 = 1,493631050, \end{aligned}$$

$$|R(f)| \leq 0,000047407407 + 0,000024651852 + 0,000021807407 + 0,000024651852 + \\ + 0,000047407407 = 0,0001659259259.$$

Odhad chyby pro 5 subintervalů bude dokonce $1,24696331 \cdot 10^8$ krát větší a skutečná chyba $3,419346638 \cdot 10^7$ krát větší než příslušná hodnota v tabulce. Z toho vyplývá, že dosáhneme výrazného zjednodušení, ale na úkor přesnosti.

6.1 Chyba složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury

Zaměříme-li se na příklad 6.4, odhad chyby i její skutečná hodnota se postupně snižovaly s rostoucím počtem uzlů. Na druhou stranu však s rostoucím n roste stupeň Legendrova polynomu a k získání jeho kořenů je nutné použít matematický software. Tím se však značně snižuje význam Gaussovy-Legendrovy kvadratury. Nabízí se otázka, zda nebude efektivnější zadaný interval nejprve rozdělit na k subintervalů, na kterých již budeme konstruovat Gaussovu-Legendrovu kvadraturu s menším počtem uzlů.

Definice 6.2. Rozdělme interval $\langle a, b \rangle$ na k stejně dlouhých subintervalů. Složenou Gaussovou-Legendrovou kvadraturou na intervalu $\langle a, b \rangle$ rozumíme předpis

$$Q_S^{\langle a, b \rangle} : f \mapsto \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} f(x_i^{\langle a_j, b_j \rangle}) (= \sum_{j=1}^k Q^{\langle a_j, b_j \rangle}(f)), \quad (21)$$

který každé funkci f spojitě na intervalu $\langle a, b \rangle$, kde $a, b \in \mathbb{R}, a < b$, přiřadí číslo $\sum_{j=1}^k Q^{\langle a_j, b_j \rangle}(f)$. Hodnoty $a_j, b_j, j \in \{1, 2, \dots, k\}$ jsou krajní body jednotlivých subintervalů a platí

$$a_j = a + (j-1) \frac{b-a}{k}, \\ b_j = a + j \frac{b-a}{k}.$$

Hodnoty $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, x_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$, kde $a_j \leq x_1^{\langle a_j, b_j \rangle} < x_2^{\langle a_j, b_j \rangle} < \dots < x_n^{\langle a_j, b_j \rangle} \leq b_j$, jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ a $A_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, A_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, A_n^{\langle a_j, b_j \rangle} \in \mathbb{R}$ jsou jim příslušné koeficienty kvadrurní formule $Q^{\langle a_j, b_j \rangle}$.

Pro další úvahy je nejprve nutné uvést následující větu.

Věta 6.2. (aditivita určitého integrálu vzhledem k mezím) Nechť f je funkce integrovatelná na intervalu $\langle a, b \rangle$. Buď $c \in (a, b)$ libovolné. Pak je f integrovatelná na intervalech $\langle a, c \rangle$ a $\langle c, b \rangle$ a platí

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^c f(x) dx + \int_c^b f(x) dx.$$

Důkaz. Důkaz je rozebrán v literatuře [1]. □

Využijeme toho, že výše uvedená věta se dá matematickou indukcí zobecnit pro libovolný konečný počet podintervalů intervalu $\langle a, b \rangle$.

Věta 6.3. *Nechť funkce f je integrovatelná na $\langle a, b \rangle$, nechť dále $k \in \mathbb{N}$ je počet podintervalů intervalu $\langle a, b \rangle$ a $a_j, b_j, j \in \{1, 2, \dots, k\}$ jsou krajní body jednotlivých podintervalů, přičemž platí $a = a_1 < b_1 = a_2 < b_2 < \dots < a_k < b_k = b$. Pak je funkce f integrovatelná na intervalech $\langle a_j, b_j \rangle$ a platí*

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=1}^k \int_{a_j}^{b_j} f(x) dx.$$

Z výše uvedené věty rovněž plyne, že hodnotu integrálu funkce f můžeme aproximovat součtem kvadraturních formulí $Q^{\langle a_j, b_j \rangle}$, kde $a_j, b_j, j \in \{1, 2, \dots, k\}$ jsou krajní body podintervalů intervalu $\langle a, b \rangle$. To znamená

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} f(x_i^{\langle a_j, b_j \rangle}) \left(= \sum_{j=1}^k Q^{\langle a_j, b_j \rangle}(f) \right),$$

kde $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, x_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ jsou uzly kvadraturní formule $Q^{\langle a_j, b_j \rangle}$ a $A_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, A_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, A_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ koeficienty kvadraturní formule $Q^{\langle a_j, b_j \rangle}$.

Pokud aproximujeme hodnotu integrálu funkce f pomocí složené Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule, dopustíme se jisté chyby. Tuto chybu označíme jako $R(f)$ a její hodnotu jsme schopni vypočítat přesně jako součet rozdílů hodnot integrálů funkce f a hodnot Gaussovy-Legendrovy kvadratury na jednotlivých subintervalech, tj.

$$R(f) = \sum_{j=1}^k \left(\int_{a_j}^{b_j} f(x) dx - Q^{\langle a_j, b_j \rangle}(f) \right).$$

Často však počítáme s funkcí, jejíž integrál není možno spočítat analyticky. Není tudíž možné spočítat hodnotu chyby přesně a je nutné přistoupit k jejímu odhadu.

Věta 6.4. *Rozdělme interval $\langle a, b \rangle$ na k stejně velkých podintervalů. Nechť $n \in \mathbb{N}$ je počet uzlů Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule v jednotlivých podintervalech a f je reálná funkce, která má na intervalu $\langle a, b \rangle$ omezenou $2n$ -tou derivaci. Pak pro chybu složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury platí vztah*

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \frac{(b-a)^{2n+1}}{2^{2n+1} k^{2n}} I_n, \quad (22)$$

přičemž

$$I_n = \int_{-1}^1 (x-x_1)^2 (x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2 dx,$$

kde $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{(-1,1)}$ a Ω je taková hodnota, že pro každé $x \in \langle a, b \rangle$ platí $|f^{(2n)}(x)| \leq \Omega$.

Důkaz. Chyba složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury bude součtem chyb na jednotlivých subintervalech. Ty spočítáme pomocí vzorce (20), tj.

$$|R(f)| \leq \sum_{j=1}^k \frac{\Omega}{(2n)!} \int_{a_j}^{b_j} (x - x_1^{\langle a_j, b_j \rangle})^2 (x - x_2^{\langle a_j, b_j \rangle})^2 \dots (x - x_n^{\langle a_j, b_j \rangle})^2 dx.$$

Připomeňme si, že hodnoty $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, x_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$, platí tudíž

$$x^{\langle a_j, b_j \rangle} = \frac{x^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} (b_j - a_j) + a_j.$$

Dále víme, že hodnoty a_j, b_j můžeme vyjádřit jako $a + (j-1)\frac{b-a}{k}, a + j\frac{b-a}{k}$. Platí tedy

$$\begin{aligned} x^{\langle a+(j-1)\frac{b-a}{k}, a+j\frac{b-a}{k} \rangle} &= \frac{x^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} (a + j\frac{b-a}{k} - a - (j-1)\frac{b-a}{k}) + a + (j-1)\frac{b-a}{k} = \\ &= \frac{x^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} (\frac{b-a}{k}) + a + (j-1)\frac{b-a}{k}. \end{aligned}$$

Po úpravě dostáváme vztah

$$\begin{aligned} |R(f)| &\leq \sum_{j=1}^k \frac{\Omega}{(2n)!} \int_{a+(j-1)\frac{b-a}{k}}^{a+j\frac{b-a}{k}} \left(x - \left(\frac{x_1^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1)\frac{b-a}{k} \right) \right)^2 \\ &\quad \left(x - \left(\frac{x_2^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1)\frac{b-a}{k} \right) \right)^2 \dots \\ &\quad \left(x - \left(\frac{x_n^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1)\frac{b-a}{k} \right) \right)^2 dx. \end{aligned}$$

Zaveďme následující substituci

$$\begin{aligned} u &= x - a - (j-1)\frac{b-a}{k} \\ du &= dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a + (j-1)\frac{b-a}{k} &\mapsto a + (j-1)\frac{b-a}{k} - a - (j-1)\frac{b-a}{k} = 0 \\ a + j\frac{b-a}{k} &\mapsto a + j\frac{b-a}{k} - a - (j-1)\frac{b-a}{k} = \frac{b-a}{k} \end{aligned}$$

a získáváme

$$|R(f)| \leq \sum_{j=1}^k \frac{\Omega}{(2n)!} \int_0^{\frac{b-a}{k}} \left(u - \frac{x_1^{\langle -1,1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} \right)^2 \left(u - \frac{x_2^{\langle -1,1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} \right)^2 \dots \left(u - \frac{x_n^{\langle -1,1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} \right)^2 du.$$

Ze všech n závorek (kořeny Legendrova polynomu mají indexy $1, 2, \dots, n$) můžeme vytknout zlomek $\frac{b-a}{2k}$ a získáváme

$$|R(f)| \leq \frac{(b-a)^{2n}}{2^{2n} k^{2n}} \sum_{j=1}^k \frac{\Omega}{(2n)!} \int_0^{\frac{b-a}{k}} \left(\frac{2ku}{b-a} - x_1^{\langle -1,1 \rangle} - 1 \right)^2 \left(\frac{2ku}{b-a} - x_2^{\langle -1,1 \rangle} - 1 \right)^2 \dots \left(\frac{2ku}{b-a} - x_n^{\langle -1,1 \rangle} - 1 \right)^2 du.$$

Opět zavedeme substituci

$$\begin{aligned} v &= \frac{2ku}{b-a} - 1 \\ \frac{b-a}{2k} dv &= du \\ 0 &\mapsto 0 - 1 = -1 \\ \frac{b-a}{k} &\mapsto \frac{2k(b-a)}{k(b-a)} - 1 = 2 - 1 = 1 \end{aligned}$$

a dostaneme

$$|R(f)| \leq \frac{(b-a)^{2n+1}}{2^{2n+1} k^{2n+1}} \sum_{j=1}^k \frac{\Omega}{(2n)!} \int_{-1}^1 \left(v - x_1^{\langle -1,1 \rangle} \right)^2 \left(v - x_2^{\langle -1,1 \rangle} \right)^2 \dots \left(v - x_n^{\langle -1,1 \rangle} \right)^2 dv.$$

V souladu s dokazovanou větou označíme proměnnou v jako x a uzly $x_1^{\langle -1,1 \rangle}, x_2^{\langle -1,1 \rangle}, \dots, x_n^{\langle -1,1 \rangle}$ jako x_1, x_2, \dots, x_n .

Všimněme si, že hodnota integrálu je nezávislá na j , takže ji můžeme vytknout. Totéž platí i pro $\frac{1}{(2n)!}$ a Ω , takže obdržíme vztah

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \frac{(b-a)^{2n+1}}{2^{2n+1} k^{2n}} \int_{-1}^1 (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 dx.$$

□

Poznámka 6.5. Povšimněme si, že hodnoty I_n závisí pouze na počtu uzlů. Pro zjednodušení dalších výpočtů můžeme hodnoty I_n pro prvních několik n tabelovat.

Počet uzlů	1	2	3	4	5
I_n	$\frac{2}{3}$	$\frac{8}{45}$	$\frac{8}{175}$	$\frac{128}{11025}$	$\frac{128}{43659}$

Příklad 6.5. Určete, jak se mění odhad chyby aproximace integrálu $\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$ s rostoucím k . Integrál funkce f aproximujte složenou Gaussovou-Legendrovou kvadraturou o třech uzlech v každém subintervalu.

Odhad chyby složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury budeme počítat pomocí vztahu

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \frac{(b-a)^{2n+1}}{2^{2n+1} k^{2n}} I_n.$$

Nejprve je zapotřebí odhadnout maximum šesté derivaci funkce f na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$. Z příkladu 6.2 víme, že

$$|f^{(6)}(x)| \leq 192 \quad (\forall x \in \langle -1, 1 \rangle).$$

Hodnotu I_3 , vyhledáme v tabulce z poznámky 6.5.

Po dosazení do vzorce (22) platí

$$|R(f)| \leq \frac{192}{720} \frac{2^7}{2^7 k^6} \frac{8}{175}.$$

Odhady chyby pro jednotlivé hodnoty k jsou zaneseny v následující tabulce.

Počet podintervalů	Odhad chyby
2	$1,904762 \cdot 10^{-4}$
3	$1,672218 \cdot 10^{-4}$
4	$2,976190 \cdot 10^{-6}$
5	$7,801904 \cdot 10^{-7}$
6	$2,612842 \cdot 10^{-7}$
7	$1,036173 \cdot 10^{-7}$
8	$4,650297 \cdot 10^{-8}$
9	$2,229385 \cdot 10^{-7}$
10	$1,219047 \cdot 10^{-8}$

6.2 Konstrukce Gaussovy-Legendrovy kvadratury s danou přesností

V předchozí kapitole jsme sestavili obecný vztah, jehož prostřednictvím můžeme odhadnout chybu aproximace složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury v případě, že se rozhodneme zkoumaný interval rozdělit na obecně k stejně velkých subintervalů. Zabývejme se nyní opačnou situací. Mějme zadání absolutní hodnoty maximální požadované chyby aproximace (označme ji E) a hledejme takový počet podintervalů intervalu, při kterém se nám podaří této přesnosti dosáhnout za předpokladu, že počet uzlů v každém subintervalu zůstává konstantní.

Jak jsme zjistili v předchozí kapitole, pro chybu aproximace platí vztah (22). Chceme-li, aby odhadovaná chyba nepřekročila zadanou hodnotu E , stačí, aby platilo (vzhledem k (22))

$$\frac{\Omega}{(2n)!} \frac{(b-a)^{2n+1}}{2^{2n+1}k^{2n}} I_n \leq E,$$

kde Ω je libovolný horní odhad funkce $|f^{(2n)}|$ na intervalu $\langle a, b \rangle$. Jelikož $k \in \mathbb{N}$, je $k^{2n} > 0$. Rovněž platí $E > 0$. Hodnotu k můžeme vyjádřit jako

$$k \geq \sqrt[2n]{\frac{\Omega}{(2n)!} \frac{(b-a)^{2n+1}}{2^{2n+1}E} I_n}.$$

Příklad 6.6. Určete, kolik podintervalů je zapotřebí k dosažení přesnosti $E = 10^{-4}$, jestliže platí $f(x) = e^{-x^2}$, $x \in \langle -1, 1 \rangle$, $n = 2$.

Hodnotu k budeme počítat pomocí vztahu

$$k \geq \sqrt[2n]{\frac{\Omega}{(2n)!} \frac{(b-a)^{2n+1}}{2^{2n+1}E} I_n}.$$

Nejprve je potřeba odhadnout absolutní hodnotu šesté derivace funkce f . Jak jsme již řešili v příkladu 6.2, $|f^{(6)}(x)| \leq 192$ pro $x \in \langle -1, 1 \rangle$. Hodnotu I_3 získáme z tabulky 6.5. Po dosažení získáme

$$k \geq \sqrt[6]{\frac{192}{(6)!} \frac{2^7}{2^7 E} \frac{8}{175}} = 2,226743082.$$

Je tedy zapotřebí rozdělit interval $\langle -1, 1 \rangle$ alespoň na tři subintervaly.

Pro kontrolu, v případě, že $k = 3$, je odhad chyby aproximace roven hodnotě 0,0000167222. Pokud bychom zvolili $k = 2$, dostaneme odhad o velikosti 0,000190476, který je již větší než požadovaná hodnota.

6.3 Srovnání chyby Gaussovy-Legendrovy kvadratury a Simpsonova pravidla

Abychom mohli plně určit přínos konstrukce složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury, budeme dosažené výsledky porovnávat s výsledky získanými další numerickou metodou. V našem případě budeme integrál funkce f aproximovat pomocí složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury se dvěma uzly v každém podintervalu a jako druhou metodu zvolíme složené Simpsonovo pravidlo.

6.3.1 Složené Simpsonovo pravidlo

Rozdělíme si zadaný interval $\langle a, b \rangle$ na k stejně velkých subintervalů s krajními body a_j, b_j , $j \in \{1, 2, \dots, k\}$. Integrál funkce f na intervalu $\langle a, b \rangle$ budeme aproximovat pomocí následujícího vzorce

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6k} \sum_{i=1}^k \left(f(a_j) + f(b_j) + 4f\left(\frac{a_j+b_j}{2}\right) \right).$$

V souladu s kapitolou 6.1 platí

$$\begin{aligned} a_j &= a + (j-1) \frac{b-a}{k}, \\ b_j &= a + j \frac{b-a}{k}. \end{aligned}$$

Po dosazení

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \\ &\approx \frac{b-a}{6k} \sum_{i=1}^k \left(f\left(a + (j-1) \frac{b-a}{k}\right) + f\left(a + j \frac{b-a}{k}\right) + 4f\left(a + j \frac{b-a}{k} - \frac{b-a}{2k}\right) \right). \end{aligned}$$

Pokud si interval $\langle a, b \rangle$ rozdělíme na obecně k subintervalů, budeme vlastně konstruovat Simpsonovu kvadraturu na $2k+1$ uzlech. Pro chybu Simpsonova pravidla platí následující věta.

Věta 6.5. *Nechť f je reálná funkce, která má na intervalu $\langle a, b \rangle$ omezenou čtvrtou derivaci. Interval $\langle a, b \rangle$ rozdělíme na k stejně velkých podintervalů. Pak pro chybu složeného Simpsonova pravidla platí vztah*

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{180} \frac{(b-a)^5}{2^4 k^4}, \quad (23)$$

kde Ω je taková hodnota, že pro každé $x \in \langle a, b \rangle$ platí $|f^{(2n)}(x)| \leq \Omega$.

Důkaz. Důkaz je proveden v literatuře [1]. □

6.3.2 Složená Gaussova-Legendrova kvadratura

Zadaný interval rozdělíme na k stejně velkých subintervalů s n uzly v každém podintervalu. Hodnotu integrálu funkce f pak budeme aproximovat pomocí vzorce

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} f(x_i^{\langle a_j, b_j \rangle}) \left(= \sum_{j=1}^k Q^{\langle a_j, b_j \rangle}(f) \right),$$

kde $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle} < x_2^{\langle a_j, b_j \rangle} < \dots < x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ a hodnoty $A_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, A_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, A_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ jim příslušné koeficienty kvadraturní formule.

Poznámka 6.6. Na základě pozorování můžeme uvedený vztah zjednodušit. Rozdělme interval $\langle a, b \rangle$ na $k \in \mathbb{N}$ stejně velkých subintervalů s krajními body a_j, b_j . Nechť $n \in \mathbb{N}$ je počet uzlů Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule v každém podintervalu. Pak jsou koeficienty $A_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, A_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, A_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ nezávislé na hodnotě j .

Důkaz. Pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadraturní formule s uzly $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle} < x_2^{\langle a_j, b_j \rangle} < \dots < x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$, přičemž $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, x_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$, budeme aproximovat hodnotu integrálu

$$\int_{a_j}^{b_j} l_i^j(x) dx,$$

kde l_i^j je elementární Lagrangeův polynom stupně $n - 1$ konstruovaný v bodech $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, x_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ pomocí vztahu (6).

Vzhledem k tomu, že Gaussova-Legendrova kvadraturní formule na n uzlech bude mít stupeň přesnosti $2n - 1$, můžeme psát

$$\int_{a_j}^{b_j} l_i^j(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} l_i^j(x).$$

Víme, že

$$l_i^j(x_l^{\langle a_j, b_j \rangle}) = 0 \text{ pro } l \neq i$$

$$\text{a} \\ l_i^j(x_l^{\langle a_j, b_j \rangle}) = 1 \text{ pro } l = i.$$

Platí tedy vztah

$$\int_{a_j}^{b_j} l_i^j(x) dx = A_i^{\langle a_j, b_j \rangle}.$$

Podobně jako v předchozí kapitole můžeme vyjádřit hodnoty a_j, b_j .

$$a_j = a + (j - 1) \frac{b - a}{k}, \\ b_j = a + j \frac{b - a}{k}$$

a vzhledem k (6) můžeme psát

$$A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} = \int_{a+(j-1)\frac{b-a}{k}}^{a+j\frac{b-a}{k}} \frac{\prod_{l=1, l \neq i}^n (x - x_l^{\langle a_j, b_j \rangle})}{\prod_{l=1, l \neq i}^n (x_i^{\langle a_j, b_j \rangle} - x_l^{\langle a_j, b_j \rangle})} dx.$$

Připomeňme si, že hodnoty $x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}, x_2^{\langle a_j, b_j \rangle}, \dots, x_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$ jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{\langle a_j, b_j \rangle}$, platí tudíž

$$x^{\langle a_j, b_j \rangle} = \frac{x^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} (b_j - a_j) + a_j = \frac{x^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1) \frac{b-a}{k}.$$

Dosazením získáváme

$$\begin{aligned} A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} &= \\ &= \int_{a+(j-1)\frac{b-a}{k}}^{a+(j-1)\frac{b-a}{k}} \frac{\prod_{l=1, l \neq i}^n (x - (\frac{x_l^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1) \frac{b-a}{k}))}{\prod_{l=1, l \neq i}^n ((\frac{x_i^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1) \frac{b-a}{k}) - (\frac{x_l^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1) \frac{b-a}{k}))} dx = \\ &= \int_{a+(j-1)\frac{b-a}{k}}^{a+(j-1)\frac{b-a}{k}} \frac{\prod_{l=1, l \neq i}^n (x - (\frac{x_l^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} + a + (j-1) \frac{b-a}{k}))}{\prod_{l=1, l \neq i}^n ((\frac{x_i^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} - \frac{x_l^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k}))} dx. \end{aligned}$$

Zaveďme následující substituci

$$\begin{aligned} u &= x - a - (j-1) \frac{b-a}{k} \\ du &= dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a + (j-1) \frac{b-a}{k} &\mapsto a + (j-1) \frac{b-a}{k} - a - (j-1) \frac{b-a}{k} = 0 \\ a + j \frac{b-a}{k} &\mapsto a + j \frac{b-a}{k} - a - (j-1) \frac{b-a}{k} = \frac{b-a}{k}. \end{aligned}$$

Dostáváme vztah

$$A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} = \int_0^{\frac{b-a}{k}} \frac{\prod_{l=1, l \neq i}^n (u - \frac{x_l^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k})}{\prod_{l=1, l \neq i}^n ((\frac{x_i^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k} - \frac{x_l^{\langle -1, 1 \rangle} + 1}{2} \frac{b-a}{k}))} du.$$

Ze všech $n-1$ závorek v čitateli a $n-1$ závorek ve jmenovateli můžeme vytknout výraz $\frac{b-a}{2k}$ a následně zlomek vykrátit. Získáváme

$$A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} = \int_0^{\frac{b-a}{k}} \frac{\prod_{l=1, l \neq i}^n (\frac{2ku}{b-a} - x_l^{\langle -1, 1 \rangle} - 1)}{\prod_{l=1, l \neq i}^n (x_i^{\langle -1, 1 \rangle} + 1 - x_l^{\langle -1, 1 \rangle} - 1)} du = \int_0^{\frac{b-a}{k}} \frac{\prod_{l=1, l \neq i}^n (\frac{2ku}{b-a} - x_l^{\langle -1, 1 \rangle} - 1)}{\prod_{l=1, l \neq i}^n (x_i^{\langle -1, 1 \rangle} - x_l^{\langle -1, 1 \rangle})} du.$$

Opět zavedeme substituci

$$\begin{aligned} v &= \frac{2ku}{b-a} - 1 \\ \frac{b-a}{2k} dv &= du \\ 0 &\mapsto -1 \\ \frac{b-a}{k} &\mapsto 2-1=1 \end{aligned}$$

a získáváme

$$A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} = \frac{b-a}{2k} \int_{-1}^1 \frac{\prod_{l=1, l \neq i}^n (v - x_l^{\langle -1, 1 \rangle})}{\prod_{l=1, l \neq i}^n (x_i^{\langle -1, 1 \rangle} - x_l^{\langle -1, 1 \rangle})} dv.$$

Označíme proměnnou v jako x a uzly $x_l^{\langle -1, 1 \rangle}$ jako x_l . Z výše uvedeného vztahu je patrné, že koeficienty $A_i^{\langle a_j, b_j \rangle}$ jsou nezávislé na hodnotě j . Jedná se dokonce o násobky koeficientů, které přísluší kořenům Legendrova polynomu $L_n^{\langle -1, 1 \rangle}$ a pro jejich výpočet můžeme použít vztah

$$A_i^{\langle a_j, b_j \rangle} = \frac{b-a}{2k} A_i^{\langle -1, 1 \rangle}.$$

□

Složená Gaussova-Legendrova kvadratura o dvou uzlech v každém subintervalu tedy bude mít následující předpis

$$\begin{aligned} Q_S^{(2)} &= \sum_{j=1}^k (A_1^{\langle a_j, b_j \rangle} f(x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}) + A_2^{\langle a_j, b_j \rangle} f(x_2^{\langle a_j, b_j \rangle})) = \\ &= \frac{b-a}{2k} \sum_{j=1}^k (A_1^{\langle -1, 1 \rangle} f(x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}) + A_2^{\langle -1, 1 \rangle} f(x_2^{\langle a_j, b_j \rangle})). \end{aligned}$$

Obdobně jako v kapitole 5.2 dopočítáme koeficienty $A_1^{\langle -1, 1 \rangle}$, $A_2^{\langle -1, 1 \rangle}$, jejichž hodnoty budou $A_1^{\langle -1, 1 \rangle} = 1$ a $A_2^{\langle -1, 1 \rangle} = 1$. Vztah tedy můžeme ještě zjednodušit a získat

$$Q_S^{(2)} = \frac{b-a}{2k} \sum_{j=1}^k (f(x_1^{\langle a_j, b_j \rangle}) + f(x_2^{\langle a_j, b_j \rangle})).$$

Příklad 6.7. Určete, jak se mění skutečná chyba a odhad chyby aproximace integrálu $\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$ s měnícím se k . Porovnejte výsledky získané aproximací pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadratury

a Simpsonova pravidla.

Nejprve přistoupíme k odhadům chyby. Pro odhad chyby složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury budeme používat vztah (22), kde $n = 2$. Absolutní hodnota čtvrté derivace funkce f nabývá svého maxima na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$ v bodě $x = 0$ a jeho hodnota je 12. Pro odhad chyby složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury tedy platí vztah

$$|R_G(f)| \leq \frac{12}{4!} \frac{2^5}{2^5 k^4} \frac{8}{45} \quad (\stackrel{\text{ozn}}{=} R_{OG}(x)).$$

Odhad chyby aproximace získané pomocí složeného Simpsonova pravidla budeme počítat pomocí vzorce (23). Dosazením dostaneme

$$|R_S(f)| \leq \frac{12}{180} \frac{2^5}{2^4 k^4} \quad (\stackrel{\text{ozn}}{=} R_{OS}(x)).$$

Abychom mohli porovnat jednotlivé metody, provedeme podíl získaných odhadů chyb, tj.

$$\frac{R_{OS}(f)}{R_{OG}(f)} = \frac{\frac{12}{180} \frac{2^5}{2^4 k^4}}{\frac{12}{4!} \frac{2^5}{2^5 k^4} \frac{8}{45}}.$$

Po úpravě získáváme

$$\frac{R_{OS}(f)}{R_{OG}(f)} = \frac{3}{2}.$$

Odhad chyby aproximace získané pomocí Simpsonova pravidla je tedy pro každé k 1,5 krát větší než odhad chyby složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury.

Nyní budeme zkoumat hodnoty skutečné chyby obou metod. Skutečnou chybu Gaussovy-Legendrovy kvadratury budeme počítat pomocí vztahu

$$R_G(f) = \int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{2k} \sum_{j=1}^k (f(x_1^{(a_j, b_j)}) + f(x_2^{(a_j, b_j)})).$$

Postup bude analogický jako v řadě předchozích příkladů. Skutečnou chybu Simpsonova pravidla pak budeme počítat pomocí vzorce

$$R_S(f) = \int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{6k} \sum_{i=1}^k \left(f\left(a + (j-1)\frac{b-a}{k}\right) + f\left(a + j\frac{b-a}{k}\right) + 4f\left(a + j\frac{b-a}{k} - \frac{b-a}{2k}\right) \right).$$

Absolutní hodnoty a odhady skutečných chyb obou metod a jejich podíl jsou shrnuty v následujících tabulkách.

k	Odhady chyb		Skutečné chyby		Podíl
	<i>Gauss</i>	<i>Simpson</i>	<i>Gauss</i>	<i>Simpson</i>	
10	$8,8889 \cdot 10^{-6}$	$1,3333 \cdot 10^{-5}$	$1,0870 \cdot 10^{-6}$	$1,6309 \cdot 10^{-6}$	1,5002564803
20	$5,5556 \cdot 10^{-7}$	$8,3333 \cdot 10^{-7}$	$6,8082 \cdot 10^{-8}$	$1,0213 \cdot 10^{-7}$	1,5000606584
30	$1,0974 \cdot 10^{-7}$	$1,6461 \cdot 10^{-7}$	$1,3453 \cdot 10^{-8}$	$2,0180 \cdot 10^{-8}$	1,5000266763
40	$3,4722 \cdot 10^{-8}$	$5,2083 \cdot 10^{-8}$	$4,2572 \cdot 10^{-9}$	$6,3858 \cdot 10^{-9}$	1,5000149509
50	$1,4222 \cdot 10^{-8}$	$2,1333 \cdot 10^{-8}$	$1,7438 \cdot 10^{-9}$	$2,6158 \cdot 10^{-9}$	1,5000095524
60	$6,8587 \cdot 10^{-9}$	$1,0288 \cdot 10^{-8}$	$8,4100 \cdot 10^{-10}$	$1,2615 \cdot 10^{-9}$	1,5000066276
70	$3,7022 \cdot 10^{-9}$	$5,5532 \cdot 10^{-9}$	$4,5400 \cdot 10^{-10}$	$6,8094 \cdot 10^{-10}$	1,5000048665
80	$2,1701 \cdot 10^{-9}$	$3,2552 \cdot 10^{-9}$	$2,6611 \cdot 10^{-10}$	$3,9916 \cdot 10^{-10}$	1,5000037246
90	$1,3548 \cdot 10^{-9}$	$2,0322 \cdot 10^{-9}$	$1,6613 \cdot 10^{-10}$	$2,4920 \cdot 10^{-10}$	1,5000029422
100	$8,8889 \cdot 10^{-10}$	$1,3333 \cdot 10^{-9}$	$1,0900 \cdot 10^{-10}$	$1,6350 \cdot 10^{-10}$	1,5000023827

Tabulka pro velké hodnoty k .

k	Odhady chyb		Skutečné chyby		Podíl
	<i>Gauss</i>	<i>Simpson</i>	<i>Gauss</i>	<i>Simpson</i>	
1000	$8,8889 \cdot 10^{-14}$	$1,3333 \cdot 10^{-13}$	$1,0900 \cdot 10^{-14}$	$1,6350 \cdot 10^{-14}$	1,500000024
2000	$5,5556 \cdot 10^{-15}$	$8,3333 \cdot 10^{-15}$	$6,8125 \cdot 10^{-16}$	$1,0219 \cdot 10^{-15}$	1,500000006
3000	$1,0974 \cdot 10^{-15}$	$1,6461 \cdot 10^{-15}$	$1,3456 \cdot 10^{-16}$	$2,0185 \cdot 10^{-16}$	1,500000003
4000	$3,4722 \cdot 10^{-16}$	$5,2083 \cdot 10^{-16}$	$4,2578 \cdot 10^{-17}$	$6,3868 \cdot 10^{-17}$	1,500000002
5000	$1,4222 \cdot 10^{-16}$	$2,1333 \cdot 10^{-16}$	$1,7440 \cdot 10^{-17}$	$2,6160 \cdot 10^{-17}$	1,500000001
6000	$6,8587 \cdot 10^{-17}$	$1,0288 \cdot 10^{-16}$	$8,4106 \cdot 10^{-18}$	$1,2616 \cdot 10^{-17}$	1,500000000
7000	$3,7022 \cdot 10^{-17}$	$5,5532 \cdot 10^{-17}$	$4,5398 \cdot 10^{-18}$	$6,8097 \cdot 10^{-18}$	1,500000000
8000	$2,1701 \cdot 10^{-17}$	$3,2552 \cdot 10^{-17}$	$2,6612 \cdot 10^{-18}$	$3,9917 \cdot 10^{-18}$	1,500000001
9000	$1,3548 \cdot 10^{-17}$	$2,0322 \cdot 10^{-17}$	$1,6614 \cdot 10^{-18}$	$2,4920 \cdot 10^{-18}$	1,500000000
10000	$8,8889 \cdot 10^{-18}$	$1,3333 \cdot 10^{-17}$	$1,0900 \cdot 10^{-18}$	$1,6350 \cdot 10^{-18}$	1,500000001

Z obou tabulek je patrné, že rovněž podíl skutečných chyb se blíží hodnotě 1,5, můžeme tedy říct, že chyba Gaussovy-Legendrovy kvadratury funkce f je 1,5 krát menší než chyba Simpsonova pravidla funkce f .

Příklad 6.8. Určete, jak se mění skutečná chyba a odhad chyby aproximace integrálu $\int_{-1}^1 \sin(x^2) dx$ s měnícím se k . Porovnejte výsledky získané aproximací pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadratury a Simpsonova pravidla.

Postup bude totožný jako v předchozím příkladu. Předpis pro čtvrtou derivaci funkce f je

$$f^{(4)}(x) = 16 \sin(x^2)x^4 - 48 \cos(x^2)x^2 - 12 \sin(x^2)$$

a maximum absolutní hodnoty funkce $f^{(4)}$ na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$ má hodnotu $-4 \sin 1 + 48 \cos 1$. Hodnoty a odhady skutečných chyb obou metod a jejich podíl jsou shrnuty v následujících tabulkách.

k	Odhady chyb		Skutečné chyby		Podíl
	Gauss	Simpson	Gauss	Simpson	
10	$1,6718 \cdot 10^{-5}$	$2,5076 \cdot 10^{-5}$	$1,0761 \cdot 10^{-5}$	$1,6135 \cdot 10^{-5}$	1,499307890
20	$1,0448 \cdot 10^{-6}$	$1,5673 \cdot 10^{-6}$	$6,6887 \cdot 10^{-7}$	$1,0032 \cdot 10^{-6}$	1,499821915
30	$2,0639 \cdot 10^{-7}$	$3,0958 \cdot 10^{-7}$	$1,3198 \cdot 10^{-7}$	$1,9796 \cdot 10^{-7}$	1,499920440
40	$6,5303 \cdot 10^{-8}$	$9,7954 \cdot 10^{-8}$	$4,1745 \cdot 10^{-8}$	$6,2615 \cdot 10^{-8}$	1,499955167
50	$2,6748 \cdot 10^{-8}$	$4,0122 \cdot 10^{-8}$	$1,7096 \cdot 10^{-8}$	$2,5643 \cdot 10^{-8}$	1,499971283
60	$1,2899 \cdot 10^{-8}$	$1,9349 \cdot 10^{-8}$	$8,2437 \cdot 10^{-9}$	$1,2365 \cdot 10^{-8}$	1,499980049
70	$6,9627 \cdot 10^{-9}$	$1,0444 \cdot 10^{-8}$	$4,4495 \cdot 10^{-9}$	$6,6741 \cdot 10^{-9}$	1,499985338
80	$4,0814 \cdot 10^{-9}$	$6,1221 \cdot 10^{-9}$	$2,6081 \cdot 10^{-9}$	$3,9121 \cdot 10^{-9}$	1,499988772
90	$2,5480 \cdot 10^{-9}$	$3,8220 \cdot 10^{-9}$	$1,6282 \cdot 10^{-9}$	$2,4423 \cdot 10^{-9}$	1,499991128
100	$1,6718 \cdot 10^{-9}$	$2,5076 \cdot 10^{-9}$	$1,0682 \cdot 10^{-9}$	$1,6023 \cdot 10^{-9}$	1,499992813

Tabulka pro velké hodnoty k .

k	Odhady chyb		Skutečné chyby		Podíl
	<i>Gauss</i>	<i>Simpson</i>	<i>Gauss</i>	<i>Simpson</i>	
1000	$1,6718 \cdot 10^{-13}$	$2,5076 \cdot 10^{-13}$	$1,0682 \cdot 10^{-13}$	$1,6022 \cdot 10^{-13}$	1,499999928
2000	$1,0448 \cdot 10^{-14}$	$1,5673 \cdot 10^{-14}$	$6,6760 \cdot 10^{-15}$	$1,0014 \cdot 10^{-14}$	1,499999981
3000	$2,0639 \cdot 10^{-15}$	$3,0958 \cdot 10^{-15}$	$1,3187 \cdot 10^{-15}$	$1,9781 \cdot 10^{-15}$	1,499999993
4000	$6,5303 \cdot 10^{-16}$	$9,7954 \cdot 10^{-16}$	$4,1725 \cdot 10^{-16}$	$6,2587 \cdot 10^{-16}$	1,499999996
5000	$2,6748 \cdot 10^{-16}$	$4,0122 \cdot 10^{-16}$	$1,7090 \cdot 10^{-16}$	$2,5636 \cdot 10^{-16}$	1,499999997
6000	$1,2899 \cdot 10^{-16}$	$1,9349 \cdot 10^{-16}$	$8,2419 \cdot 10^{-17}$	$1,2363 \cdot 10^{-16}$	1,499999998
7000	$6,9627 \cdot 10^{-17}$	$1,0444 \cdot 10^{-16}$	$4,4488 \cdot 10^{-17}$	$6,6732 \cdot 10^{-17}$	1,499999999
8000	$4,0814 \cdot 10^{-17}$	$6,1221 \cdot 10^{-17}$	$2,6078 \cdot 10^{-17}$	$3,9117 \cdot 10^{-17}$	1,499999999
9000	$2,5480 \cdot 10^{-17}$	$3,8220 \cdot 10^{-17}$	$1,6280 \cdot 10^{-17}$	$2,4421 \cdot 10^{-17}$	1,500000000
10000	$1,6718 \cdot 10^{-17}$	$2,5076 \cdot 10^{-17}$	$1,0682 \cdot 10^{-17}$	$1,6022 \cdot 10^{-17}$	1,500000000

Jak si můžeme povšimnout, také v tomto případě se poměr chyb blíží k hodnotě 1,5, pro velká k se tedy poměr skutečných chyb blíží k poměru jejich odhadů.

7 Gaussova-Čebyševova kvadrurní formule

Definice 7.1. Uvažujme váhovou funkci $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ na intervalu $I = (-1, 1)$. Polynomy, které získáme ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem ke skalárnímu součinu

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 u(x)v(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx,$$

jsou Čebyševovy polynomy. Gaussovu kvadrurní formuli pro aproximaci integrálu

$$\int_{-1}^1 f(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

budeme nazývat Gaussova-Čebyševova kvadrurní formule.

Věta 7.1. Nechť f je reálná funkce, která má na intervalu $(-1, 1)$ omezenou $2n$ -tou derivaci ($n \in \mathbb{N}$). Pak pro chybu Gaussovy-Čebyševovy kvadratury platí vztah

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_{-1}^1 (x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx,$$

kde $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou kořeny Čebyševova polynomu $T_n^{(-1,1)}$ a Ω je taková hodnota, že pro každé $x \in (-1, 1)$ platí $|f^{(2n)}(x)| \leq \Omega$.

Důkaz. Obecný důkaz byl proveden v kapitole 5.7. □

Příklad 7.1. Pomocí Gaussovy-Čebyševovy kvadrurní formule o třech uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_{-1}^1 \frac{1}{(1+x^2)\sqrt{1-x^2}} dx$ a odhadněte chybu aproximace.

Váhová funkce bude vypadat následovně

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Dále platí $f(x) = \frac{1}{(1+x^2)}$, $x \in (-1, 1)$, $n = 3$.

Čebyševův polynom třetího stupně bude mít tvar

$$T_3^{(-1,1)}(x) = x^3 - \frac{3}{4}x$$

a kořeny $x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{2}$, $x_2 = 0$, $x_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}$.

Nyní je potřeba spočítat koeficienty kvadraturní formule jako řešení následující soustavy rovnic

$$\begin{aligned} Q^{(-1,1)}(1) &= A_1 + A_2 + A_3 = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \pi \\ Q^{(-1,1)}(x) &= A_1 \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + 0A_2 + A_3 \frac{\sqrt{3}}{2} = \int_{-1}^1 \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0 \\ Q^{(-1,1)}(x^2) &= A_1 \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 + 0A_2 + A_3 \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 = \int_{-1}^1 \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{2}. \end{aligned}$$

Jejím vyřešením získáváme koeficienty $A_1 = A_2 = A_3 = \frac{\pi}{3}$. Předpis pro Gaussovu-Čebyševovu kvadraturu bude vypadat následovně

$$Q^{(-1,1)}(f) = \frac{\pi}{3}f(x_1) + \frac{\pi}{3}f(x_2) + \frac{\pi}{3}f(x_3) = \frac{\pi}{3}f\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + \frac{\pi}{3}f(0) + \frac{\pi}{3}f\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right).$$

Po vyčíslení pak získáme

$$Q^{(-1,1)}(f) = \frac{5\pi}{7} \doteq 2,243994753.$$

Nyní přistoupíme k odhadu chyby. Za tímto účelem budeme používat vzorec

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_a^b (x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2 w(x) dx.$$

Nejprve je nutné odhadnout hodnotu šesté derivace funkce f na intervalu $(-1, 1)$. Platí

$$|f^{(6)}(x)| \leq 720.$$

Pro chybu Gaussovy-Čebyševovy kvadratury tedy platí vztah

$$|R(f)| \leq \frac{720}{720} \int_{-1}^1 \left(x + \frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 (x-0)^2 \left(x - \frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = 9,817477044 \cdot 10^{-2}.$$

Při aproximaci se tedy dopustíme chyby o velikosti nejvýše $9,817477044 \cdot 10^{-2}$, pro hledanou hodnotu integrálu tedy platí

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{(1+x^2)\sqrt{1-x^2}} dx \in \langle 2,145819983; 2,342169523 \rangle.$$

Pro srovnání, skutečná hodnota počítaného integrálu je

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{(1+x^2)\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\sqrt{2}\pi}{2} \doteq 2,221441469,$$

nachází se tedy v námi spočítaném intervalu.

8 Gaussova-Laguerrova kvadraturní formule

Definice 8.1. Uvažujme váhovou funkci $w(x) = e^{-x}$ na intervalu $I = \langle 0, +\infty \rangle$. Polynomy, které získáme ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem ke skalárnímu součinu

$$\langle u, v \rangle = \int_0^{+\infty} u(x)v(x)e^{-x} dx,$$

jsou Laguerrovy polynomy. Gaussovu kvadraturní formuli pro aproximaci integrálu

$$\int_0^{+\infty} f(x)e^{-x} dx$$

budeme nazývat Gaussova-Laguerrova kvadraturní formule.

Věta 8.1. Nechť f je reálná funkce, která má na intervalu $\langle 0, +\infty \rangle$ omezenou $2n$ -tou derivaci ($n \in \mathbb{N}$). Pak pro chybu Gaussovy-Laguerrova kvadratury platí vztah

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_0^{+\infty} (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 e^{-x} dx,$$

kde $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou kořeny Laguerrova polynomu $G_n^{(0,+\infty)}$ a Ω je taková hodnota, že pro každé $x \in \langle 0, +\infty \rangle$ platí $|f^{(2n)}(x)| \leq \Omega$.

Důkaz. Obecný důkaz byl proveden v kapitole 5.7. □

Příklad 8.1. Pomocí Gaussovy-Laguerrovy kvadraturní formule o třech uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_0^{+\infty} e^{-x} \cos x dx$ a odhadněte chybu aproximace.

Pro váhovou funkci bude v tomto případě platit

$$w(x) = e^{-x}.$$

Dále platí $f(x) = \cos x$, $x \in \langle 0, +\infty \rangle$, $n = 3$.

Laguerrov polynom třetího stupně na intervalu $\langle 0, +\infty \rangle$ bude mít tvar

$$G_3^{(0,+\infty)}(x) = x^3 - 9x^2 + 18x - 6$$

a následující kořeny

$$\begin{aligned} x_1 &= -\sqrt{3} \cos\left(\frac{1}{3} \arctg(\sqrt{2})\right) + 3 - 3 \sin\left(\frac{1}{3} \arctg(\sqrt{2})\right), \\ x_2 &= -\sqrt{3} \cos\left(\frac{1}{3} \arctg(\sqrt{2})\right) + 3 + 3 \sin\left(\frac{1}{3} \arctg(\sqrt{2})\right), \\ x_3 &= 2\sqrt{3} \cos\left(\frac{1}{3} \arctg(\sqrt{2})\right) + 3. \end{aligned}$$

Nyní je potřeba spočítat koeficienty kvadraturní formule jako řešení následující soustavy rovnic

$$Q^{(0,+\infty)}(1) = A_1 + A_2 + A_3 = \int_0^{+\infty} e^{-x} dx = 1$$

$$Q^{(0,+\infty)}(x) = A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3 = \int_0^{+\infty} x e^{-x} dx = 1$$

$$Q^{(0,+\infty)}(x^2) = A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 + A_3 x_3^2 = \int_0^{+\infty} x^2 e^{-x} dx = 2.$$

Koeficienty kvadraturní formule pro jejich složitost vyjádříme numericky a platí

$A_1 = 0,7110930106$, $A_2 = 0,2785177335$, $A_3 = 0,01038925655$. Pro Gaussovu-Laguerrovu kvadraturu platí

$$Q^{(0,+\infty)}(f) = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + A_3 f(x_3) = 0,4765208395.$$

Chybu Gaussovy-Laguerrovy kvadratury budeme opět počítat pomocí obecného vzorce

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_I (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 w(x) dx.$$

Pro hodnotu šesté derivace funkce $f(x) = \cos x$ na intervalu $\langle 0, +\infty \rangle$ platí

$$|f^{(6)}(x)| \leq 1.$$

Není těžké si uvědomit, že hodnota $(x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2$ je vlastně druhá mocnina Laguerrova polynomu $G_3^{(0,+\infty)}$, díky čemuž se můžeme vyhnout práci s poměrně složitými tvary uzlů. Pro chybu Gaussovy-Laguerrovy kvadratury platí vztah

$$|R(f)| \leq \frac{1}{720} \int_0^{+\infty} (x^3 - 9x^2 + 18x - 6)^2 e^{-x} dx = 5 \cdot 10^{-2}.$$

Při aproximaci se tedy dopustíme chyby o velikosti nejvýše $5 \cdot 10^{-2}$, pro hledanou hodnotu integrálu platí

$$\int_0^{+\infty} \cos x e^{-x} dx \in \langle 0,4265208395; 0,5265208395 \rangle.$$

Pro srovnání, skutečná hodnota počítaného integrálu je

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} \cos x dx = 0,5,$$

nachází se tedy v námi spočítaném intervalu.

9 Gaussova-Hermitova kvadraturní formule

Definice 9.1. Uvažujme váhovou funkci $w(x) = e^{-x^2}$ na intervalu $I = (-\infty, +\infty)$. Polynomy, které získáme ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem ke skalárnímu součinu

$$\langle u, v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u(x)v(x)e^{-x^2} dx,$$

jsou Hermitovy polynomy. Gaussovu kvadraturní formuli pro aproximaci integrálu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-x^2} dx$$

budeme nazývat Gaussova-Hermitova kvadraturní formule.

Věta 9.1. Nechť f je reálná funkce, která má na intervalu $(-\infty, +\infty)$ omezenou $2n$ -tou derivaci ($n \in \mathbb{N}$). Pak pro chybu Gaussovy-Hermitovy kvadratury platí vztah

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_{-\infty}^{+\infty} (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 e^{-x^2} dx,$$

kde $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jsou kořeny Hermitova polynomu $M_n^{(-\infty, +\infty)}$ a Ω je taková hodnota, že pro každé $x \in (-\infty, +\infty)$ platí $|f^{(2n)}(x)| \leq \Omega$.

Důkaz. Obecný důkaz byl proveden v kapitole 5.7. □

Příklad 9.1. Pomocí Gaussovy-Hermitovy kvadraturní formule o třech uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \cos x dx$ a odhadněte chybu aproximace.

Váhová funkce bude mít následující tvar

$$w(x) = e^{-x^2}.$$

Dále platí $f(x) = \cos x$, $x \in (-\infty, \infty)$, $n = 3$.

Hermitův polynom třetího stupně na intervalu $(-\infty, \infty)$ bude vypadat následovně

$$M_3^{(-\infty, \infty)}(x) = x^3 - \frac{3}{2}x$$

a pro jeho kořeny platí $x_1 = -\frac{\sqrt{6}}{2}$, $x_2 = 0$, $x_3 = \frac{\sqrt{6}}{2}$.

Nyní je potřeba spočítat koeficienty kvadraturní formule jako řešení následující soustavy rovnic

$$\begin{aligned} Q^{(-\infty, +\infty)}(1) &= A_1 + A_2 + A_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \\ Q^{(-\infty, +\infty)}(x) &= A_1 \left(-\frac{\sqrt{6}}{2}\right) + 0A_2 + A_3 \frac{\sqrt{6}}{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2} dx = 0 \\ Q^{(-\infty, +\infty)}(x^2) &= A_1 \left(-\frac{\sqrt{6}}{2}\right)^2 + 0A_2 + A_3 \left(\frac{\sqrt{6}}{2}\right)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \end{aligned}$$

Jejím vyřešením získáváme koeficienty $A_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}$, $A_2 = \frac{2\sqrt{\pi}}{3}$, $A_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}$. Předpis pro Gaussovu-Hermitovu kvadraturu bude vypadat následovně

$$\begin{aligned} Q^{(-\infty, +\infty)}(f) &= \frac{\sqrt{\pi}}{6} f(x_1) + \frac{2\sqrt{\pi}}{3} f(x_2) + \frac{\sqrt{\pi}}{6} f(x_3) = \frac{\sqrt{\pi}}{6} f\left(-\frac{\sqrt{6}}{2}\right) + \frac{2\sqrt{\pi}}{3} f(0) + \\ &+ \frac{\sqrt{\pi}}{6} f\left(\frac{\sqrt{6}}{2}\right). \end{aligned}$$

Po vyčíslení pak získáme

$$Q^{(-\infty, +\infty)}(f) = 1,382033071.$$

Nyní přistoupíme k odhadu chyby. Za tímto účelem budeme používat vzorec

$$|R(f)| \leq \frac{\Omega}{(2n)!} \int_{-\infty}^{+\infty} (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \dots (x - x_n)^2 w(x) dx.$$

Nejprve je nutné odhadnout hodnotu šesté derivace funkce f na intervalu $(-\infty, +\infty)$. Platí

$$|f^{(6)}(x)| \leq 1.$$

Pro chybu Gaussovy-Hermitovy kvadratury platí vztah

$$|R(f)| \leq \frac{720}{720} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x + \frac{\sqrt{6}}{2}\right)^2 (x - 0)^2 \left(x - \frac{\sqrt{6}}{2}\right)^2 e^{-x^2} dx = 1,846306095 \cdot 10^{-3}.$$

Při aproximaci se tedy dopustíme chyby o velikosti nejvýše $1,846306095 \cdot 10^{-3}$, pro hledanou hodnotu integrálu platí

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \cos x dx \in \langle 1,380186765; 1,383879377 \rangle.$$

Pro srovnání, skutečná hodnota počítaného integrálu je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \cos x \, dx = 1,380388447,$$

nachází se tedy v námi spočítaném intervalu.

10 Obecná Gaussova kvadratura

Až dosud jsme se zabývali Gaussovými kvadraturami s takovou váhovou funkcí, pro niž je systém ortogonálních polynomů znám a hojně uveden v literatuře. Nyní budeme aproximovat hodnotu integrálu funkce, pro kterou budeme muset příslušný n -tý ortogonální polynom dopočítat pomocí Gramovy-Schmidtovy ortogonalizace.

Příklad 10.1. Pomocí Gaussovy kvadraturní formule o dvou uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_0^1 \sin x \ln x \, dx$ a odhadněte chybu aproximace.

Funkci w zvolíme následovně

$$w(x) = -\ln x.$$

Funkce w je spojitá na intervalu $(0, 1)$ a splňuje podmínku

$$w(x) > 0, \quad \forall x \in (0, 1).$$

Dále musíme vyšetřit, zda je splněna podmínka

$$\int_0^1 -|x|^k \ln x \, dx < +\infty.$$

Na intervalu $(0, 1)$ platí

$$|x|^k \leq 1.$$

Nerovnost vynásobíme hodnotou $-\ln(x) \geq 0$ a poté zintegrujeme. Získáme

$$\int_0^1 -|x|^k \ln x \, dx \leq \int_0^1 -\ln x \, dx.$$

Integrál na pravé straně nerovnosti má následující hodnotu

$$\int_0^1 -\ln x \, dx = 1 < +\infty,$$

platí tedy rovněž

$$\int_0^1 -|x|^k \ln x \, dx < +\infty.$$

Funkce w splňuje všechny podmínky požadované v definici 3.1, je tedy váhovou funkcí.

V rámci příkladu budeme ortogonalizovat posloupnost $1, x, x^2, \dots$ (jedná se o prvky prostoru F) vzhledem ke skalárnímu součinu

$$\langle u, v \rangle = \int_0^1 -u(x)v(x) \ln x \, dx. \quad (24)$$

Polynom $p_2^{(0,1)}$ získaný ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem k (24) bude vypadat následovně

$$p_2^{(0,1)}(x) = x^2 - \frac{5}{7}x - \frac{17}{252}$$

a bude mít kořeny $x_1 = \frac{5}{14} - \frac{\sqrt{106}}{42}$, $x_2 = \frac{5}{14} + \frac{\sqrt{106}}{42}$.

Koeficienty A_1 , A_2 získáme vyřešením soustavy rovnic

$$Q^{(0,1)}(1) = A_1 + A_2 = \int_0^1 \ln x \, dx = 1$$

$$Q^{(0,1)}(x) = A_1 \left(\frac{5}{14} - \frac{\sqrt{106}}{42} \right) + A_2 \left(\frac{5}{14} + \frac{\sqrt{106}}{42} \right) = \int_0^1 x \ln x \, dx = \frac{1}{4}$$

a jejich hodnoty budou $A_1 = \frac{1}{2} + \frac{9\sqrt{106}}{424}$, $A_2 = \frac{1}{2} - \frac{9\sqrt{106}}{424}$.

Pro Gaussovu kvadraturu platí

$$\begin{aligned} Q^{(0,1)}(1) &= \left(\frac{1}{2} + \frac{9\sqrt{106}}{424} \right) \sin \left(\frac{5}{14} - \frac{\sqrt{106}}{42} \right) - \left(\frac{1}{2} - \frac{9\sqrt{106}}{424} \right) \sin \left(\frac{5}{14} + \frac{\sqrt{106}}{42} \right) = \\ &= -0,2397677151. \end{aligned}$$

Nyní přistoupíme k odhadu chyby. Pro čtvrtou derivaci funkce f na intervalu $(0, 1)$ platí

$$|f^{(4)}(x)| \leq \sin 1.$$

Po dosazení do vztahu (20) získáváme

$$\begin{aligned} |R(f)| &\leq \frac{\sin 1}{24} \int_0^1 - \left(x - \left(\frac{5}{14} - \frac{\sqrt{106}}{42} \right) \right)^2 \left(x - \left(\frac{5}{14} + \frac{\sqrt{106}}{42} \right) \right)^2 \ln x \, dx = \\ &= 1,000205260 \cdot 10^{-4}. \end{aligned}$$

Pro hledanou hodnotu integrálu tedy platí

$$\int_0^1 \sin x \ln x \, dx \in \langle -0,2398677356; -0,2396676946 \rangle.$$

Pro srovnání, skutečná hodnota vypadá následovně

$$\int_0^1 \sin x \ln x \, dx = -0,2398117420.$$

Příklad 10.2. Pomocí Gaussovy kvadraturní formule o dvou uzlech určete přibližně hodnotu integrálu $\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx$ a odhadněte chybu aproximace.

Jako funkci w tentokrát zvolíme

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}.$$

O funkci $\frac{1}{\sqrt{x}}$ víme, že je spojitá na intervalu $(0, 1)$ a splňuje podmínku

$$w(x) > 0, \quad \forall x \in (0, 1).$$

Musíme zjistit, zda je pro váhovou funkci w splněna podmínka

$$\int_0^1 |x|^k \frac{1}{\sqrt{x}} dx < +\infty.$$

Postup bude podobný jako v předchozím příkladu. Na intervalu $(0, 1)$ platí

$$|x|^k \leq 1.$$

Nerovnost vynásobíme výrazem $\frac{1}{\sqrt{x}}$, který bude kladný pro všechna x z intervalu $(0, 1)$, a následně zintegrujeme. Obdržíme vztah

$$\int_0^1 |x|^k \frac{1}{\sqrt{x}} dx \leq \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx.$$

Integrál na pravé straně rovnosti bude konečný, tj.

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 2 < +\infty,$$

platí tedy

$$\int_0^1 |x|^k \frac{1}{\sqrt{x}} dx < +\infty.$$

Zjistili jsme, že funkce w splňuje všechny podmínky požadované v definici 3.1, je tedy váhovou funkcí.

Budeme ortogonalizovat posloupnost $1, x, x^2, \dots$ (jedná se o prvky prostoru F) podle skalárního součinu

$$\int_0^1 u(x)v(x)x \frac{1}{\sqrt{x}} dx.$$

Polynom $p_2^{(0,1)}$ který získáme ortogonalizací posloupnosti $1, x, x^2, \dots$ vzhledem k výše uvedenému skalárnímu součinu bude mít následující tvar

$$p_2^{(0,1)}(x) = x^2 - \frac{6}{7}x - \frac{3}{35}$$

a kořeny $x_1 = \frac{3}{7} - \frac{2\sqrt{30}}{35}$, $x_2 = \frac{3}{7} + \frac{2\sqrt{30}}{35}$.

Nyní dopočítáme koeficienty A_1 , A_2 jako řešení následující soustavy rovnic

$$Q^{(0,1)}(1) = A_1 + A_2 = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 2$$

$$Q^{(0,1)}(x) = A_1 \left(\frac{3}{7} - \frac{2\sqrt{30}}{35} \right) + A_2 \left(\frac{3}{7} + \frac{2\sqrt{30}}{35} \right) = \int_0^1 x \frac{1}{\sqrt{x}} dx = \frac{2}{3}$$

a jejich hodnoty budou $A_1 = 1 + \frac{\sqrt{30}}{18}$, $A_2 = 1 - \frac{\sqrt{30}}{18}$.

Pro Gaussovu kvadraturu platí

$$\begin{aligned} Q^{(0,1)}(1) &= \left(1 + \frac{\sqrt{30}}{18} \right) \cos \left(\frac{3}{7} - \frac{2\sqrt{30}}{35} \right) - \left(1 - \frac{\sqrt{30}}{18} \right) \cos \left(\frac{3}{7} + \frac{2\sqrt{30}}{35} \right) = \\ &= 1,808616395. \end{aligned}$$

Nyní budeme odhadovat hodnotu chyby. Pro čtvrtou derivaci funkce f na intervalu $(0, 1)$ platí

$$|f^{(4)}(x)| \leq 1.$$

Po dosazení do vztahu (20) dostaneme

$$\begin{aligned} |R(f)| &\leq \frac{1}{24} \int_0^1 \left(x - \left(\frac{3}{7} - \frac{2\sqrt{30}}{35} \right) \right)^2 \left(x - \left(\frac{3}{7} + \frac{2\sqrt{30}}{35} \right) \right)^2 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = \\ &= 4,837490552 \cdot 10^{-4}. \end{aligned}$$

Pro hledanou hodnotu integrálu platí

$$\int_0^1 \cos x \frac{1}{\sqrt{x}} dx \in \langle 1,808132646; 1,809100144 \rangle.$$

Pro srovnání, skutečná hodnota vypadá následovně

$$\int_0^1 \cos x \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 1,809048476.$$

11 Závěr

Ačkoli se v literatuře o Gaussově kvadratuře nehovoří tak často jako například o Newtonových-Cotesových vzorcích, ukázalo se, že i ona má své nesporné výhody. Poskytuje poměrně spolehlivý aparát pro přibližný výpočet hodnoty integrálu a určení chyby, které se při aproximaci dopustíme, i pro integrály na otevřeném nebo neomezeném intervalu, případně integrály funkcí, jež mají v krajních bodech intervalu I singularity. Další z výhod je i fakt, že k provedení většiny výpočtů, které se v rámci práce vyskytovaly, není nutná rozsáhlá znalost lineární algebry, matematické analýzy či programování.

Při psaní bakalářské práce jsem měla možnost získat ucelený přehled poznatků, které je zapotřebí znát při konstrukci a určování chyby Gaussovy kvadratury, a jejich shrnutí provedla v prvních několika kapitolách. Rovněž jsem se věnovala hledání optimální polohy uzlů pro konstrukci kvadraturní formule maximální přesnosti a zabývala se některými problémy, jež mohou nastat.

Rozhodla jsem se však primárně věnovat Gaussově-Legendrově kvadraturní formuli, která, vzhledem k výhodnému tvaru váhové funkce, dává prostor k dalším zjednodušením. Tuto kvadraturní formuli jsem se rozhodla prezentovat pomocí jednoduchých příkladů a na základě experimentů pak mohla vypořádat některé její vlastnosti.

V literatuře, již jsem měla možnost prostudovat, autoři většinou zvětšovali přesnost aproximace pouze zvyšováním počtu uzlů. To však, jak jsem měla možnost zjistit, výrazně zkomplikovalo počítání kořenů a následně i výpočet koeficientů. Alternativním způsobem, který jsem se rozhodla prezentovat, je užití složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury, jež nám umožňuje zvýšit přesnost aproximace, aniž bychom se museli trápit s polynomy vyšších stupňů a rozsáhlejšími soustavami rovnic. Přestože se o složených Gaussových kvadraturách v literatuře, z níž jsem čerpala, nehovoří, ukázalo se, že jde o poměrně užitečný aparát a rozhodně může mít své uplatnění v numerickém integrování.

Abych mohla plně určit přínos složené Gaussovy-Legendrovy kvadratury, rozhodla jsem se ji srovnat s další numerickou metodou, Simpsonovým pravidlem. Zjistila jsem, že Gaussova-Legendrova kvadratura vykazuje větší přesnost, navíc po uplatnění objevených vztahů je i její konstrukce srovnatelně obtížná, možná dokonce jednodušší.

V následujících kapitolách jsem se věnovala dalším specifickým Gaussovým kvadraturám a práci s nimi ilustrovala pomocí příkladů. Při výpočtech jsem se mnohdy opírala o matematický software Maple, v němž jsem si pro zefektivnění dalších výpočtů implementovala všechny potřebné funkce.

Tvorba bakalářské práce byla po všech stránkách velkým přínosem, zejména jako námět k zamýšlení nad provázaností, která existuje mezi jednotlivými matematickými disciplínami.

12 Literatura

- [1] JARNÍK Vojtěch. *Integrální počet (I)*. 5. vydání. Praha: Academia, 1974.
- [2] HOROVÁ, Ivana, ZELINKA, Jiří. *Numerické metody*. Dotisk druhého rozšířeného vydání. Brno: Masarykova univerzita, 2008. ISBN 978-80-210-3317-7.
- [3] ZEIDLER, Eberhard. *Oxford User's Guide to Mathematics*. Ilustrované vydání, dotisk. New York: Oxford University Press, 2004. ISBN 0 19 8507631.
- [4] VODSTRČIL, Petr. *Od numerického integrování k lineární algebře ...* [online]. 2010 [cit. 2013-04-24]. Dostupné z:
<http://mi21.vsb.cz/sites/mi21.vsb.cz/files/vodstrcil_text.pdf>
- [5] TICHÝ, Petr. *Interpolace, ortogonální polynomy, Gaussova kvadratura* [online]. 2012 [cit. 2013-04-03]. Dostupné z:
<http://home.zcu.cz/~ptichy/kma/download/texts/NA_07.pdf>
- [6] VONDRÁK, Vít, POSPÍŠIL, Lukáš. *Numerické metody I* [online]. 2011 [cit. 2013-04-24]. Dostupné z :
<http://mi21.vsb.cz/sites/mi21.vsb.cz/files/unit/numericke_metody.pdf>

A Příloha na CD

Příložené CD obsahuje následující soubory

Functions.mws - soubor funkcí pro provádění některých výpočtů, které se v práci objevily

Calling.mws - ukázkové volání implementovaných funkcí

Help.mws - nápověda ke všem implementovaným funkcím

Help.hdb - soubor přidružený k nápovědě